

КСЕ часть 5

ХИМИЯ

Специфика химии как науки (определение предмета химии)

Химия:

- Наука о химических элементах и их соединениях.
- Наука о веществах и их превращениях.
- Наука о процессах качественного превращения веществ.
- Наука, изучающая свойства и превращения веществ, сопровождающиеся изменением их состава и строения.
- Система знаний о химических элементах и их соединениях, энергетике химических процессов, реакционной способности веществ, катализаторах и т.д.

Основная проблематика:

Системообразующим началом современной химии является:

- Проблема получения вещества с заданными свойствами. Практическая реализация этой проблемы обеспечивается производственной деятельностью людей.
- Проблема выявления и определения методов (способов) управления свойствами вещества. Решение этой проблемы определяется уровнем развития химического знания и организацией научно-исследовательской деятельности.

В этом и заключается основная проблема химии и системообразующее начало ее как науки. Вся история химии, вся эволюция химических знаний является процессом смены способов решения ее основной проблемы.

Специфика химии как науки (химическая картина Мира)

Химическая картина мира

Формируется на основе четырех концептуальных систем химического знания: учения о составе вещества, структурной химии, учения о химических процессах, эволюционной химии

ее содержанием является

Концептуальные знания о строении материального мира со стороны его химического содержания

Концептуальные знания о развитии материального мира в плане его химической эволюции

Концептуальные знания о происхождении основных видов и форм вещества, о его химической структуре

Концептуальные знания о природных процессах химического движения

Концептуальные знания теоретических основ химии:
строение атома, учение о химической связи,
катализе, реакционной способности веществ и
другие направления в химии

Специфика химии как науки (концептуальные системы химических знаний)

Развитие химии – это процесс становления концептуальных систем, причем каждая новая возникала на основе предыдущей и включала ее в себя в преобразованном виде

Учение о составе 1660-е гг.

Это первый концептуальный уровень. Данный уровень связан с исследованием различных свойств веществ в зависимости от их химического состава, определяемого их химическими элементами. В период с середины XVII в. До второй половины XIX в. Учение о составе вещества представляло собой всю химию. Оно существует и сегодня, представляя собой часть химии

Структурная химия 1800-е гг.

Второй концептуальный уровень познания свойств предполагает исследование структуры, т.е. способа взаимодействия элементов вещества. К этому времени стало очевидно, что свойства веществ, их качественное разнообразие обуславливаются не только составом, но и структурой молекул. Этот уровень, как более высокий, включает в себя первый

Учение о химических Процессах 1950-е гг.

Третий концептуальный уровень связан с исследованием внутренних механизмов и условий протекания химических процессов (скорость протекания процессов, температура, давление и т.п.). Химия становится наукой не только о веществах, сколько о процессах и механизмах изменения вещества

Эволюционная химия 1970-е гг.

Четвертый концептуальный уровень представляет собой развитие предыдущего уровня. Он предполагает более глубокое изучение природы и условий протекания химических процессов (применение катализаторов и т.п.). На этом уровне наблюдается самоорганизация химических процессов

Проблемы современной химии (структура химических соединений; часть II)

Проблемы на уровне структурной химии:*

- По современным представлениям структура молекул – это пространственная и энергетическая упорядоченность квантово-механической системы, состоящей из атомных ядер и электронов.
- Структурная химия ограничена рамками знаний только о молекулах вещества, находящегося в дореакционном состоянии. Одних этих знаний недостаточно для управления процессами превращения вещества. Согласно структурным теориям, должны быть вполне осуществимы многие реакции. Однако большое количество реакций органического синтеза, основанных лишь на принципах структурной химии, имеют очень низкие выходы продукции и очень большие побочные отходы. Кроме того, для производства на основе органического синтеза использовалось дорогостоящее сырье сельскохозяйственного производства.
- Проблемы структурной неорганической химии – это, по существу, проблемы химии твердого тела, а именно: поиск путей синтеза кристаллов с максимальным приближением к идеальной решетке для получения материалов с высокой механической прочностью, термической стойкостью и долговечностью; создание методов получения кристаллов, содержащих запроектированные дефекты решетки, чтобы получить материалы с заданными электрофизическими и оптическими свойствами.

* «Структурная химия» - термин условный. Речь идет об уровне развития химических знаний, при котором основную роль играет понятие «структура» (структура молекулы реагента, в том числе макромолекулы или монокристалла)

Проблемы современной химии (проблемы учения о химических процессах)

Проблемы учения о химических процессах:*

- Способность к взаимодействию различных реагентов определяется не только их атомно-молекулярной структурой, но и условиями протекания химических реакций.
- К условиям протекания химических процессов относятся термодинамические (характеризующие зависимость реакций от температуры, давления и т.п.) и кинетические факторы.
- Термодинамическое воздействие влияет преимущественно на направленность химических процессов. Функции управления скоростью химических процессов выполняет химическая кинетика. Она устанавливает зависимость протекания химических процессов от множества структурно-кинетических факторов: строения исходных реагентов; их концентрации; наличия в реакторе катализаторов (или ингибиторов) и других добавок; способов смешивания реагентов; материала и конструкции реактора и т.п. Влияние такого типа факторов на ход химических реакций может быть сведено и к катализатору, т.е. к положительному воздействию на химический процесс, и к ингибированию, сдерживающему процесс.
- Катализ – это процесс изменения скорости или возбуждения химической реакции веществами-катализаторами, которые участвуют в реакции, но не входят в состав конечных продуктов. Вещества, замедляющие химическую реакцию, называются ингибиторами.
- Катализ играет решающую роль в процессе перехода от химических систем к биологическим.

* Современное учение о химических процессах – наглядный пример глубокой взаимосвязи физических, химических и биологических знаний. В основе данного учения лежит химическая термодинамика и кинетика – традиционные области физической химии.

Проблемы современной химии (эволюционная химия; часть I)

Самоорганизация* эволюционных систем

Существуют два подхода к проблеме самоорганизации предбиологических систем

Субстратный подход

Отличительная черта этого подхода состоит в исследовании вещественной основы биологических систем, т.е. определенного состава элементов – органоенов и определенной структуры входящих в живой организм химических соединений.

Результатом субстратного подхода к проблеме биогенеза является накопленная информация об отборе химических элементов и структур

Функциональный подход

Отличительная черта данного подхода состоит в исследовании процессов самоорганизации материальных систем, выявления законов, которым подчиняются такие процессы

* Понятие «самоорганизация» означает упорядоченность существования материальных динамических, т.е. качественно изменяющихся систем

Проблемы современной химии (эволюционная химия; часть II)

Самоорганизация эволюционных систем (субстратный подход):

Отбор химических элементов в процессе самоорганизации предбиологических систем внес определенные закономерности в этот процесс:

- Основу живых систем составляют только шесть элементов, получивших название органоенов: углерод, водород, кислород, азот, фосфор, сера, общая весовая доля которых в организме составляет более 97%. За ними следуют 11 элементов, которые принимают участие в построении многих физиологически важных компонентов биосистем: натрий, калий, кальций, магний, железо, кремний, алюминий, хлор, медь, цинк, кобальт. Их весовая доля в организме – 1,6%. Есть еще 20 элементов, участвующих в построении и функционировании отдельных узкоспецифических биосистем, для которых составляет около 1%. Участие всех остальных элементов в построении биосистем практически не зафиксировано.
- Картина химического мира свидетельствует об отборе элементов. В настоящее время насчитывается около 8 млн. химических соединений. Из них 96% - органические, состоящие из тех же 6-18 элементов. Из остальных 90 химических элементов Природа создала всего около 300 тыс. неорганических соединений.
- Геохимические условия не играют существенной роли в отборе химических элементов при формировании органических и биологических систем. Определяющими факторами в отборе химических элементов в данном случае выступают условия соответствия этих элементов определенным требованиям: а) способность образовывать прочные и энергоемкие химические связи; б) эти связи должны быть лабильны, т.е. легко подвергающиеся гомолизу, гетеролизу или циклическому перераспределению. Вот почему углерод отобран из многих других элементов как органоен №1.

Проблемы современной химии (эволюционная химия; часть III)

Эволюционные проблемы в химии:

- Под эволюционными проблемами в химии понимают процессы самопроизвольного синтеза новых химических соединений, являющихся более сложными и высокоорганизованными продуктами по сравнению с исходными веществами. Поэтому эволюционную химию считают предтечей биологии – наукой о самоорганизации и о саморазвитии химических систем.
- Все функции и процессы, происходящие в живом организме, можно изложить на языке химии, в виде конкретных химических процессов.
- Основной исключительной эффективности биологических процессов является биокатализ. Поэтому новая химия должна основываться на каталическом опыте живой природы.
- Для освоения каталического опыта живой природы перспективным направлением являются исследования, ориентированные на применение принципов биокатализа в химии и химической технологии, что предполагает изучение закономерностей живой природы, в том числе и опыта формирования фермента, клетки, организма. Здесь и заложены основы эволюционной химии, предполагающей пути новых химических технологий, способных стать аналогами живых систем.
- Эволюционная химия – это новое управление химическими процессами, предполагающее применение принципов синтеза себе подобных молекул. По принципу ферментов создадутся катализаторы с таким разнообразием качеств, которые далеко превзойдут катализаторы, существующие в химической промышленности.
- Возникновению эволюционной химии способствовали исследования в области моделирования биокатализаторов и реально ощутимые успехи «нестационарной кинетики» или динамики химических систем.
- Ведущее положение в развитии нестационарной кинетики занимает теория саморазвития открытых каталических систем, способствующая существенному улучшению свойств катализатора.

Проблемы современной химии (эволюционная химия; часть IV)

Теория саморазвития элементарных открытых каталических систем:*

- Теория саморазвития элементарных открытых каталических систем в самом общем виде является общей теорией химической эволюции и биогенеза.
- Основные проблемы данной теории – это вопросы о движущих силах и механизмах эволюционного процесса, т.е. вопросы выявления и определения основных закономерностей химической эволюции, отбора элементов и структур, уровня химической организации и иерархии химических систем как следствия эволюции.
- Суть данной теории – химическая эволюция есть не что иное как саморазвитие каталических систем. Эволюционирующим доминантом являются катализаторы.
- Саморазвитие, самоорганизация, самоусложнение происходит за счет естественного отбора активных каталических центров и постоянного притока трансформируемой энергии. Поскольку источником энергии в основном является базисная реакция, то эволюционное преимущество получают каталические системы, протекающие на основе экзотермических реакций. Отсюда базисная реакция является источником энергии и средством отбора прогрессивных эволюционных изменений катализаторов.
- Практическим результатом теории открытых каталических систем является «нестационарная технология», характеризующаяся меняющимися условиями химической реакции. В настоящее время обнаружено большое количество нестационарных режимов, способствующих интенсификации реакции. Частным случаем нестационарного режима является стационарный режим, который до недавнего времени считался гарантом высокой эффективности промышленного процесса.
- Перспектива развития новой химии – это создание малоотходных, безотходных и энергосберегающих промышленных технологий.

* Данная теория была разработана в 1964г. А.П. Руденко.

Проблемы современной химии (эволюционная химия; часть V)

Самоорганизация эволюционных систем:

- Каким образом Природа из минимума химических элементов и соединений создала сложнейший высокоорганизованный комплекс биосистем?
- В настоящее время ясно, что в ходе эволюции отбирались те структуры, которые способствовали резкому повышению активности и селективности действия каталических групп. Есть уже и некоторые выводы, полученные различными путями в самых различных областях науки (космохимии, геологии, геохимии, биохимии, термодинамике, химической кинетике):
 - a) На ранних стадиях химической эволюции мира катализ отсутствовал. Условия высоких температур (более 5000K), электрических разрядов и радиации препятствовали образованию конденсированного состояния.
 - b) Первые проявления катализа начинаются при смягчении условий (при температуре ниже 5000K) и образовании первичных твердых тел.
 - c) Роль катализатора возрастала по мере того, как физические условия приближались к земным. Но общее значение катализа вплоть до образования более или менее сложных органических молекул оставалось несущественным.
 - d) Появление таких относительно несложных систем, как CH_3OH , $\text{CH}_2=\text{CH}_2$, H_2CO , HCOOH , а тем более, аминокислот и первичных сахаров было некаталической подготовкой старта для большого катализа.
 - e) Роль катализа в развитии химических систем после достижения стартового состояния, т.е. известного количественного минимума органических и неорганических соединений, начала возрастать довольно быстро. Отбор активных соединений происходил в природе из тех продуктов, которые получались относительно большим числом химических способов и обладали широким каталическим спектром.