化学学科常用符号公式及其表示

方程式

又称化学反应式、化学反应方程式，是用化学式来描述各种物质之间的不同化学反应的式子（类似于数学公式，注意特殊符号表达）

- 一般化学方程式
  - 各反应物与各生成物之间用"+"号连接，读作"和"，在反应物与生成物之间用"→"连接，读作"生成"
- 热化学方程式
  - 在配平完的方程式后根据事实写上"△H=Q"，其中Q代表放出或吸收的热量（焓变）。放热反应，Q<0；吸热反应，Q>0
- 反应条件
  - △代表加热
    - $2Cu + O_2 \xrightarrow{\triangle} 2CuO$
  - 某物质名称代表此物质为催化剂
    - $2H_2O_2 \xrightarrow{MnO_2} O_2\uparrow + 2H_2O$
  - 其他反应条件（如通电、光照）均以文字标明
- 反应现象
  - ↑代表此生成物为气体，且反应物中无气体
    - $2H_2O \longrightarrow O_2\uparrow + 2H_2\uparrow$
  - ↓代表此生成物有沉淀，且反应物中无固体
    - $Ca(OH)_2 + CO_2 \longrightarrow CaCO_3\downarrow + H_2O$

非结构式

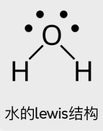
- 分子式
  - 是用元素符号及各元素个数表示物质（单质、化合物）分子的组成、该物质分子量的化学式；分子式仅能表示一个分子所含每种原子的数目，并不能表明分子的结构。
    - $C_6H_{12}O_6$
      葡萄糖一个分子含6个碳原子、12个氢原子、6个氧原子
- 实验式（最简式）
  - 实验式（empirical formula）又称简式、最简式，是一种表示化合物中各原子最简单整数比例的化学式。
    对化合物来说，它们的分子式是最简式的整数倍，或者说分子量是最简式的整数倍。仅当分子量和最简式式量相同时，最简式才和分子式相同，这时最简式就是分子式。
    - 常见物质对比

物质	分子式	最简式
水	H_2O	H_2O
甲烷	CH_4	CH_4
苯	C_6H_6	CH
硫	S_8	S
葡萄糖	$C_6H_{12}O_6$	CH_2O

    - 注意：实验式并不能区分最简整数比相同的几种化学物质，更不能解释结构或区分同分异构体

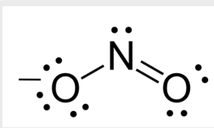
结构式

- 路易斯结构
  - 又称路易斯点图像、电子点图像、路易斯电子点式、路易斯点结构、电子点结构，是分子中原子和原子键结和标示孤对电子存在的图像。路易斯结构可以画出表示分子中的共价键以及配位化合物
    - 水的lewis结构

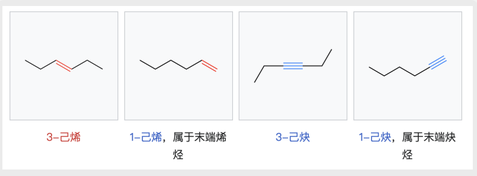


    - 碳原子的lewis结构

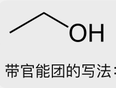
    - 亚硝酸根的lewis结构



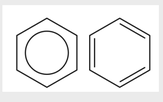
- 结构简式
  - 表示简化结构式的化学式称为示性式，所以一般用来表示有机物。结构简式通常包括烃基及官能团两部分。同时不应简化掉例如碳碳双键、碳碳三键等与有机物性质密切相关的结构。碳氧双键一般可忽略
    - 丙烷：$CH_3CH_2CH_3$
    - 乙醇：CH_3CH_2OH
    - 乙烯：$CH_2{=}CH_2$
    - 异己烷(2-甲基戊烷)：$CH_3(CH_2)_2CH(CH_3)_2$
    - 常见官能团：碳碳双键、碳碳三键、羟基、羧基、醚键、醛基等。官能团对有机物的性质起决定作用，—X、OH、-CHO、-COOH、-NO2、-SO3H等决定了有机物中的卤代烃、醇或酚、醛、羧酸、硝基化合物或亚硝酸酯、磺酸类有机物的化学性质
- 键线式
  - 也称骨架式、拓扑式、折线简式，是在纸面表示分子结构的一种方法，在表示有机化合物的立体结构时尤其常用。用键线式表示的结构简明易懂，并且容易书写
    - 线形结构



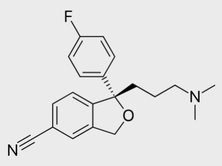
    - 带官能团的写法：乙醇



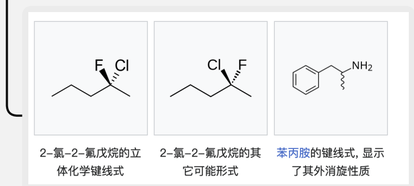
    - 环形结构：苯环的两种写法



    - SSRI类抗抑郁药艾司西酞普兰的键线式结构。只有杂原子、碳-碳键和立体化学特征表现出来，所有的碳原子、氢原子和碳-氢键都被省略。



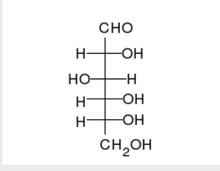
    - 写法规则
      - 1.画出分子骨架：画出除碳-氢键外的所有化学键。通常所有的氢原子及碳-氢键均省略不画，碳原子用相邻的线的交点表示，一般情况下不用注明。单键用线段表示，双键和三键分别用平行的两条和三条线表示。对碳原子而言，单键和双键之间键角为120°，涉及三键的键角为180°。氢原子数可根据碳为四价的原则而相应地在碳上补充。例如，碳与两个基团相连时，补充两个氢；与三个基团相连时，补充一个氢，等等。
      - 2.如化合物的键序不是整数，则可用虚线表示
      - 3.环形结构用相应边数的多边形来表示
      - 4.苯的结构可用两种方法表示
      - 5.官能团需要标明。标明时可以缩写（如-CN），也可以不缩写（如-C≡N）。
      - 6.杂原子（非碳、氢原子）不得省略，并且其上连有的氢也一般不省略，见右图的乙醇结构。
    - 立体结构表示
      - 实线代表位于平面上的键
        - Plain bond
      - 楔形线表示向上伸出纸面，朝向观察者的键
        - Wedged bond
      - 虚线代表向下伸出纸面，远离观察者的键
        - Dashed bond
      - 波形线代表键可以处于上述两种位置之一，即分子为外消旋混合物或键的立体特征不明。
        - Wavy bond
      - 氨键用虚线表示。
      - 例子



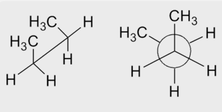
2-氯-2-氟戊烷的立体化学键线式
2-氯-2-氟戊烷的其它可能形式
苯丙胺的键线式，显示了其外消旋性质

- 哈沃斯投影式
  - 是表示单糖、双糖或多糖所含单糖环形结构的一种常用方法
    - α-D-吡喃葡萄糖的哈沃斯透视式

    - fisher投影式（会向哈沃斯投影式转变）

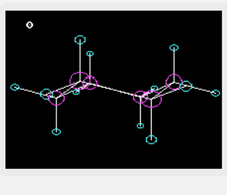


- 纽曼投影式（扭曼式）
  - 是表示有机化合物立体结构的一种方法，它是沿碳-碳键的键轴的投影。以交叉的三根键表示位于前方的碳原子及其键，以被一个圆挡住的三根键表示位于后方的碳原子及其键。
    若该碳-碳键为重叠式构象，六根键中前后两两重合，则通常把后方的键稍微偏转一个角度，以表示出来。
    - 邻交叉式丁烷的锯架式及纽曼式。



分子模型

- 球棍模型，空间填充模型
  - 是一种空间填充模型，用来表现化学分子的三维空间分布。在此作图方式中，杆代表共价键，可连结以球表示的原子中心



线性表示

- 简化分子线性输入规范（SMILES），维斯威歌线性表示式 (WLN)
  - 是史上最早的、可以精确标示一个化合物的线性表示式
    - 总的原则是精简、不使用过多符号。以基团未基本字母做表示，符号则由其他东西组成。
      碳原子使用数字符号、X、Y、C表示。
      数字符号表示烷基的碳链长度。当碳链长度超过10时亦如此，如十八酸钠（18VONa）。
      X为四叉碳基，象形。
      Y为三叉碳基，象形。（此处不区别C基与CH基，而是以不饱和度间接计算出氢数）
      C只使用在当碳只和两个原子结键时。如二氧化碳（OCO）、氰化氢（NCH）。
      - 不常用

其他

- 分子图，国际化合物标识（InChI），热稳球体
  - 国际化合物标识
    - 是由国际纯粹与应用化学联合会和国家标准技术研究所联合制定的，用以唯一标识化合物IUPAC名称的字符串。
    - https://github.com/IUPAC-InChI/InChI

Presented with xmind