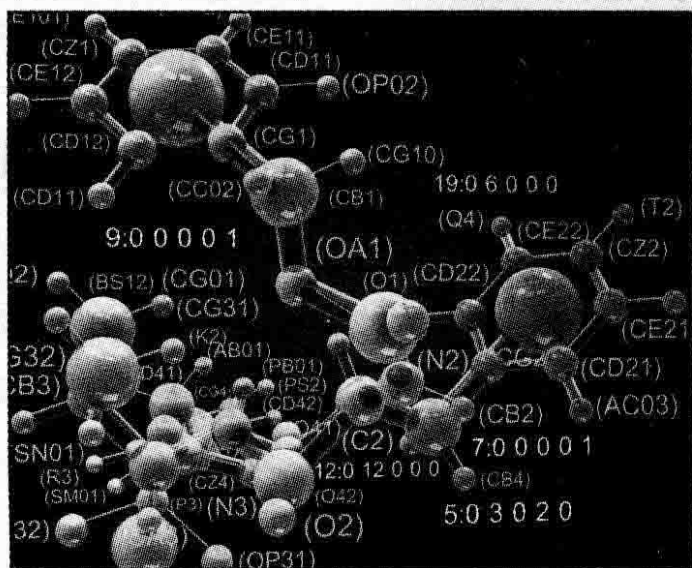




化学原理

Principle of Chemistry

主编 李文有 张禄梅

重庆大学出版社

内容摘要

本书是按照化工及相关专业对化学基础知识和原理的基本要求,在教学实践和广泛征集意见的基础上编写而成。除绪论外,全书共分为10章,主要内容包括气体、液体和溶液;原子结构;分子结构与晶体结构;化学热力学初步;化学反应动力学——反应速率和反应机理;相律与相图;电解质溶液;氧化还原反应;配位化合物;元素化学导论。

本书可作为高职高专院校化学、化工、纺织、制药、材料、轻工、食品、冶金、环保、生物工程等专业的化学原理和基础化学教材,也可用作成人教育化工类及相关专业的学习用书。

图书在版编目(CIP)数据

化学原理/李文有,张禄梅主编. —重庆:重庆大学出版社,2015.8

ISBN 978-7-5624-9390-7

I. ①化… II. ①李…②张… III. ①化学—高等职业教育—教材 IV. ①O6

中国版本图书馆CIP数据核字(2015)第197977号

化学原理

主 编 李文有 张禄梅

策划编辑:鲁 黎

责任编辑:陈 力 版式设计:鲁 黎

责任校对:张红梅 责任印制:赵 晟

*

重庆大学出版社出版发行

出版人:邓晓益

社址:重庆市沙坪坝区大学城西路21号

邮编:401331

电话:(023) 88617190 88617185(中小学)

传真:(023) 88617186 88617166

网址:<http://www.cqup.com.cn>

邮箱:fxk@cqup.com.cn (营销中心)

全国新华书店经销

自贡兴华印务有限公司印刷

*

开本:787×1092 1/16 印张:18.25 字数:462千 插页:8 开1页

2015年8月第1版 2015年8月第1次印刷

印数:1—1 000

ISBN 978-7-5624-9390-7 定价:38.00元

本书如有印刷、装订等质量问题,本社负责调换

版权所有,请勿擅自翻印和用本书

制作各类出版物及配套用书,违者必究

前言

本书是按照化工及相关专业对化学基础知识和原理的基本要求,在教学实践和广泛征集意见的基础上编写而成。除绪论外,全书共分为 10 章,主要内容包括气体、液体和溶液;原子结构;分子结构与晶体结构;化学热力学初步;化学反应动力学;相律与相图;电解质溶液;氧化还原反应;配位化合物;元素化学导论。

本书体现了近年来高职高专化学课程教学改革成果,突出“实用为主,够用为度,应用为本”的特色。从教学实际出发,整合无机化学和物理化学的相关基础内容,并根据高职学生的特点,注重基本概念和基本知识的阐述,并力求做到循序渐进、由浅入深,理论与实际相结合,加强实用性,以利于高职学生对知识的理解和掌握。并强化了与后续专业课程的衔接以及与生产、生活实际联系较为密切的内容。

本书由李文有、张禄梅共同编写,其中李文有编写绪论、第 1 章至第 4 章;张禄梅编写第 5 章至第 10 章。本书在编写过程中,得到了许新兵、刘吉和以及孔祥波等老师的关心和帮助,在此表示衷心的感谢。

限于编者的水平,本书疏漏之处在所难免,敬请同行与读者批评指正。

编者

2015 年 1 月

目 录

绪 论	1
一、什么是化学?	1
二、化学简史——从黑色魔术到现代科学.....	1
三、化学王国的版图.....	4
四、化学的理论支柱.....	5
五、化学——面向未来.....	5
六、如何学好化学原理?	8
七、科学方法论.....	9
八、科学计算——有效数字.....	9
第1章 气体、液体和溶液	11
一、理想气体状态方程	11
二、道尔顿分压定律	13
三、阿麦格分体积定律	15
四、真实气体	16
五、气体的临界状态及液化条件	18
六、溶液浓度及溶解度	18
七、稀溶液的依数性	21
第2章 原子结构.....	27
一、原子的组成	27
二、原子核外电子的排布	28
三、原子结构与元素周期系	36
四、原子结构与元素性质的关系	37
第3章 分子结构与晶体结构.....	45
一、化学键	45
二、分子间力与氢键	53
三、晶体的结构和类型	58
第4章 化学热力学初步.....	64
一、化学反应方向和化学平衡	64

二、热力学基本概念	65
三、热力学第一定律及应用	69
四、热力学第二定律及熵判据	84
第5章 化学反应动力学——反应速率和反应机理	94
一、化学反应速率的表示	94
二、基元反应和复合反应	96
第6章 相律与相图	109
一、相律	109
二、单组分系统相图	111
三、二组分系统气液平衡相图	114
四、三组分体系的相图	134
第7章 电解质溶液	138
一、电解质的分类	138
二、酸碱理论	139
三、弱电解质的解离平衡	141
四、两性物质的溶液	145
五、同离子效应和盐效应	146
六、缓冲溶液	147
七、盐类水解	150
八、沉淀溶解平衡与溶度积规则	153
第8章 氧化还原反应	162
一、氧化还原反应的基本概念	163
二、原电池	166
三、电极电势	168
四、电极电势的应用	172
五、化学电源	176
第9章 配位化合物	182
一、配位化合物的基本概念	182
二、配合物的组成	183
三、配合物的命名	184
四、螯合物	185
五、配位平衡	186
六、配离子稳定常数的应用	188
七、配合物的性质	190
第10章 元素化学导论	193
一、元素概论	193
二、s 区元素	193
三、ds 区元素	204

四、d 区元素	212
五、f 区元素	225
附录	277
附录 1 国际单位制	277
附录 2 原子量四位数表(以 ¹² C = 12 相对原子质量为 标准)	278
附录 3 常压下共沸物的沸点和组成	279
附录 4 有机化合物的标准摩尔燃烧焓	280
附录 5 几种化合物的热力学函数	280
附录 6 18 ~ 25 °C 下难溶化合物的溶度积	281
附录 7 25 °C 下醋酸在水溶液中的电离度和离解常数	281
附录 8 不同温度下水的饱和蒸气压	282
参考文献	284

绪 论

一、什么是化学

“化学”一词,若仅是从字面解释就是“变化的科学”。化学如同物理一样皆为自然科学的基础科学,是一门以实验为基础的自然科学。很多人称化学为“中心科学”,因为化学为部分科学学科的核心,如材料科学、纳米科技、生物化学等。化学是在原子层次上研究物质的组成、结构、性质以及变化规律的科学,这也是化学变化的核心基础。

化学对人们认识和利用物质具有重要的作用。宇宙是由物质组成的,化学则是人类认识和改造物质世界的主要方法和手段之一,它是一门历史悠久而又富有活力的学科,与人类进步和社会发展的关系非常密切,其成就是社会文明的重要标志。

从开始用火的原始社会,到使用各种人造物质的现代社会,人类都在享用化学成果。人类的生活能够不断提高和改善,化学的贡献在其中起了重要的作用。

二、化学简史——从黑色魔术到现代科学

化学的历史渊源非常古老,可以说从人类学会使用火就开始了最早的化学实践活动。我们的祖先钻木取火、利用火烘烤食物、寒夜取暖、驱赶猛兽,充分利用燃烧时的发光发热现象,当时这只是一经验的积累。化学知识的形成、化学的发展经历了漫长而曲折的道路。它伴随着人类社会的进步而发展,是社会发展的必然结果。而它的发展,又促进了生产力的发展,推动历史的前进。化学的发展,主要经历了下述几个时期。

1. 萌芽时期

从远古到公元前 1500 年,人类学会在熊熊的烈火中由黏土制出陶器、由矿石烧出金属,学会从谷物酿造出酒、给丝麻等织物染上颜色,这些都是在实践经验的直接启发下经过长期摸索而来的最早的化学工艺,但还没有形成化学知识,只是化学的萌芽时期。古时候,原始人类为了他们的生存,在与自然界的种种灾难进行抗争的过程中,发现和利用了火。从原始人类用火

之时开始,他们由野蛮进入文明,同时也就开始了用化学方法认识和改造天然物质。燃烧就是一种化学现象(火的发现和利用,改善了人类生存的条件,并使人类变得聪明而强大)。在掌握了火以后,人类开始食用熟食;继而人类又陆续发现了一些物质的变化,如发现在翠绿色的孔雀石等铜矿石上面燃烧炭火,会有红色的铜生成。在中国,铁器牛耕引发的社会变革推动了化学的发展。这样,人类在逐步了解和利用这些物质变化的过程中,制得了对人类具有使用价值的产品。人类逐步学会了制陶、冶炼;而后又懂得了酿造、染色等。这些由天然物质加工改造而成的制品,成为古代文明的标志。在这些生产实践的基础上,萌发了古代化学知识。

2. 丹药时期

从公元前 1500 年到公元 1650 年,化学被炼丹术、炼金术所控制。为求得长生不老的仙丹或象征富贵的黄金,炼丹家和炼金术士们开始了最早的化学实验。而后记载、总结炼丹术的书籍也相继出现。虽然炼丹家、炼金术士们都以失败而告终,但他们在炼制长生不老药的过程中,在探索“点石成金”的方法中实现了物质间用人工方法进行的相互转变,积累了许多物质发生化学变化的条件和现象,为化学的发展积累了丰富的实践经验。当时出现的“化学”一词,其含义便是“炼金术”。但随着炼丹术、炼金术的衰落,人们更多地看到其荒唐的一面,实际上,化学方法转而在医药和冶金方面得到正当发挥,中、外药物学和冶金学的发展为化学成为一门科学准备了丰富的素材。与此同时,进一步分类研究了各种物质的性质,特别是相互反应的性能,这些都为近代化学的产生奠定了基础,许多器具和方法经过改进后,仍然在今天的化学实验中沿用。炼丹家在实验过程中发明了火药,发现了若干元素,制成了某些合金,还制出和提纯了许多化合物,这些成果我们至今仍在利用。

3. 燃素时期

燃素时期从 1650 到 1775 年,是近代化学的孕育时期。随着冶金工业和实验室经验的积累,人们总结感性知识,进行化学变化的理论研究,使化学成为自然科学的一个分支。这一阶段开始的标志是英国化学家波义耳为化学元素定义了科学的概念。继之,化学又借燃素说从炼金术中解放出来。燃素说认为,可燃物能够燃烧是因为它含有燃素,燃烧过程是可燃物中燃素放出的过程,尽管这个理论是错误的,但它把大量的化学事实统一在一个概念之下,解释了许多化学现象。在燃素说流行的一百多年间,化学家为解释各种现象做了大量的实验,发现多种气体的存在,积累了更多关于物质转化的新知识。特别是燃素说,认为化学反应是一种物质转移到另一种物质的过程,化学反应中物质守恒,这些观点奠定了近代化学思维的基础。这一时期,不仅从科学实践上,还从思想上都为近代化学的发展做了准备,这一时期成为近代化学的孕育时期。从 16 世纪开始,欧洲工业生产蓬勃兴起,推动了医药化学和冶金化学的创立和发展。使炼金术转向生活和实际应用,继而更加注意物质化学变化本身的研究。在元素的科学概念建立后,通过对燃烧现象的精密实验研究,建立了科学的氧化理论和质量守恒定律,随后又建立了定比定律、倍比定律和化合量定律,为化学进一步科学的发展奠定了基础。

4. 发展时期

发展时期从 1775 到 1900 年,是近代化学发展的时期。1775 年前后,拉瓦锡用定量化学实验阐述了燃烧的氧化学说,开创了定量化学时期,使化学沿着正确的轨道发展。19 世纪初,英国化学家道尔顿提出近代原子学说,着重强调了各种元素原子的质量为其最基本的特征,其中量的概念的引入,是与古代原子论的一个主要区别。近代原子论使当时的化学知识和理论得到了合理的解释,并成为说明化学现象的统一理论,随后意大利科学家阿伏伽德罗提出分子

概念。自从用原子—分子论来研究化学,化学才真正被确立为一门科学。这一时期,建立了不少化学基本定律。俄国化学家门捷列夫发现元素周期律,德国化学家李比希和维勒发展了有机结构理论,这些都使化学成为一门系统的科学,也为现代化学的发展奠定了基础。

19 世纪下半叶,热力学等物理学理论引入化学之后,不仅澄清了化学平衡和反应速率的概念,而且可以定量地判断化学反应中物质转化的方向和条件。从而相继建立了溶液理论、电离理论、电化学和化学动力学的理论基础。物理化学的诞生,将化学从理论上提高到一个新的水平。通过对矿物的分析,发现了许多新元素,加上对原子分子学说的实验验证,经典性的化学分析方法也有了自己的体系。草酸和尿素的合成、原子价概念的产生、苯的六环结构和碳价键四面体等学说的创立、酒石酸拆分成旋光异构体,以及分子的不对称性等的发现,导致了有机化学结构理论的建立,使人们对分子本质的认识更加深入,并奠定了有机化学的基础。

5. 现代时期

20 世纪的化学是一门建立在实验基础上的科学,实验与理论一直是化学研究中相互依赖、彼此促进的两个方面。进入 20 世纪以后,由于受自然科学其他学科发展的影响,并广泛地应用了当代科学的理论、技术和方法,化学在认识物质的组成、结构、合成和测试等方面都有了长足的进展,而且在理论方面取得了许多重要成果。在无机化学、分析化学、有机化学和物理化学四大分支学科的基础上产生了新的化学分支学科。

近代物理的理论和数学方法、计算机技术在化学中的应用,对现代化学的发展起了很大的推动作用。19 世纪末,电子、X 射线和放射性的发现为化学研究在 20 世纪的重大发展创造了条件。

在结构化学方面,由于电子的发现开始从而确立的现代的有核原子模型,不仅丰富和深化了对元素周期表的认识,而且发展了分子理论。

从氢分子结构的研究开始,逐步揭示了化学键的本质,先后创立了价键理论、分子轨道理论和配位场理论。化学反应理论也随着深入微观境界。应用 X 射线作为研究物质结构的新分析手段,其可以洞察物质的晶体化学结构。测定化学立体结构的衍射方法有 X 射线衍射、电子衍射和中子衍射等,其中以 X 射线衍射法的应用所积累的精密分子立体结构信息为最多。

研究物质结构的谱学方法也由可见光谱、紫外光谱、红外光谱扩展到核磁共振谱、电子自旋共振谱、光电子能谱、射线共振光谱、穆斯堡尔谱等,与计算机联用后,积累了大量物质结构与性能相关的资料,正由经验向理论发展。电子显微镜放大倍数也在不断提高,从而使人们可以直接观察分子的结构。

经典的元素学说由于放射性的发现而产生了深刻的变革。从放射性衰变理论的创立、同位素的发现到人工核反应和核裂变的实现、氦的发现、中子和正电子及其他基本粒子的发现,不仅使人类的认识深入亚原子层次,而且创立了相应的实验方法和理论;不仅实现了古代炼丹家转变元素的思想,而且改变了人的宇宙观。

作为 20 世纪的时代标志,人类开始掌握和使用核能。放射化学和核化学等分支学科相继产生,并迅速发展;同位素地质学、同位素宇宙化学等交叉学科接踵诞生/元素周期表扩充了,并且正在探索超重元素以验证元素“稳定岛假说”。与现代宇宙学相依存的元素起源学说和与演化学说密切相关的核素年龄测定等工作,都在不断补充和更新元素的观念。

酚醛树脂的合成,开辟了高分子科学领域。20 世纪 30 年代聚酰胺纤维的合成,使高分子

的概念得到了广泛的确认。后来,高分子的合成、结构和性能研究、应用 3 方面保持互相配合和促进,使高分子化学得以迅速发展。

各种高分子材料的合成和应用,为现代工农业、交通运输、医疗卫生、军事技术,以及人们衣食住行各方面提供了多种性能优异而成本较低的重要材料,成为现代物质文明的重要标志。高分子工业发展为化学工业的重要支柱,20 世纪是有机合成的黄金时代。化学的分离手段和结构分析方法已经有了很大发展,许多天然有机化合物的结构问题纷纷获得圆满解决,还发现了许多新的重要的有机反应和专一性有机试剂,在此基础上,精细有机合成,特别是在不对称合成方面取得了很大进展。

一方面,合成了各种有特种结构和特种性能的有机化合物;另一方面,合成了从不稳定的自由基到有生物活性的蛋白质、核酸等生命基础物质。有机化学家还合成了有复杂结构的天然有机化合物和有特效的药物。这些成就对促进科学的发展起了巨大的作用,为合成有高度生物活性的物质,并与其他学科协同解决有生命物质的合成问题及解决前生命物质的化学问题等提供了有利条件。

20 世纪以来,化学发展的趋势可以归纳为:由宏观向微观、由定性向定量、由稳定态向亚稳定态发展,由经验逐渐上升到理论,再用于指导设计和开拓创新的研究。一方面,为生产和技术部门提供尽可能多的新物质、新材料;另一方面,在与其他自然科学相互渗透的进程中不断产生新学科,并向探索生命科学和宇宙起源的方向发展。

三、化学王国的版图

化学在发展过程中,根据所研究的分子类别和研究手段、目的、任务的不同,派生出不同层次的许多分支。在 20 世纪 20 年代以前,化学传统地分为无机化学、有机化学、物理化学和分析化学 4 个分支。20 年代以后,由于世界经济的高速发展,化学键的电子理论和量子力学的诞生、电子技术和计算机技术的兴起,化学研究在理论上和实验技术上都获得了新的手段,导致这门学科自 20 世纪 30 年代以来的飞跃发展,出现了崭新的面貌。化学内容一般分为生物化学、有机化学、高分子化学、应用化学、化学工程学、物理化学、无机化学七大类共 80 项,即实际包括了七大分支学科。

根据当今化学学科的发展以及它与天文学、物理学、数学、生物学、医学、地学等学科相互渗透的情况,化学可作下所述分类。

1. 无机化学

无机化学包括元素化学、无机合成化学、无机高分子化学、无机固体化学、配位化学(即络合物化学)、同位素化学、生物无机化学、金属有机化学、金属酶化学等。

2. 有机化学

有机化学包括普通有机化学、有机合成化学、金属和非金属有机化学、物理有机化学、生物有机化学、有机分析化学。

3. 物理化学

物理化学包括结构化学、热化学、化学热力学、化学动力学、电化学、溶液理论、界面化学、胶体化学、量子化学、催化作用及其理论等。

4. 分析化学

分析化学包括化学分析、仪器和新技术分析。具体内容有性能测定、监控、各种光谱和光化学分析、各种电化学分析方法、质谱分析法、各种电镜、成像和形貌分析方法,在线分析、活性分析、实时分析等,各种物理化学性能和生理活性的检测方法,萃取、离子交换、色谱、质谱等分离方法,分离分析联用、合成分离分析三联用等。

5. 高分子化学

高分子化学包括天然高分子化学、高分子合成化学、高分子物理化学、高聚物应用、高分子物理。

6. 核化学

核化学包括放射性元素化学、放射分析化学、辐射化学、同位素化学、核化学。

7. 生物化学

生物化学一般是指生物化学、酶类、微生物化学、植物化学、免疫化学、发酵和生物工程、食品化学、煤化学等。

其他与化学有关的边缘学科还有:地球化学、海洋化学、大气化学、环境化学、宇宙化学、星际化学等。

四、化学的理论支柱

化学的主要理论支柱是热力学、统计力学和量子力学三大部分。热力学和量子力学适用于微观系统,统计力学则为二者的桥梁。原则上用统计力学方法能通过分子、原子的微观数据来推断或计算物质的宏观现象。

五、化学——面向未来

未来化学在人类生存、生存质量和安全方面将以新的思路、观念和方式发挥核心科学的作用。应该说,20 世纪的化学科学在保证人们衣食住行需求、提高人民生活水平和健康状态等方面起了重大作用。展望未来,人口、环境、资源、能源问题日趋严重,人类的生存会不会成问题,生存质量是会再提高,还是要下降?虽然这些难题的解决要依赖各个学科,但是无论如何总是要依靠物质基础。即需要优化资源利用、更有效地控制自然的和人为的过程、提供更有效、更安全的化学品等。在这些方面,未来化学将仍然是提供解决人类赖以进步的物质基础这一难题的核心科学。

1. 化学仍是解决食物短缺问题的主要学科之一

食物问题是涉及人类生存和生存质量的重大问题。以我国人口来说,预计在 21 世纪上半叶将达到 16 亿,今后任务的严重性在于:既要增加食物产量保证人类生存,又要保证质量以保证人类安全,还要保护耕地草原,改善农牧业生态环境,以保持农牧业可持续发展。生物学将在提供优良物种、提供转基因生物等方面作出贡献。但是这一切必须得到化学的支撑。化学将在设计、合成功能分子和结构材料以及从分子层次阐明和控制生物过程(如光合作用、动植

物生长)的机理等方面,为研究开发高效安全肥料、饲料和肥料饲料添加剂、农药、农用材料(如生物可降解的农用薄膜)、环境友好的生物肥料、生物农药等打下基础。

再进一步看,未来的食品将不只满足人类生存的需要,还要在提高人类生存质量、提高健康水平和身体素质方面起作用。人们已经看到利用食品保健是大势所趋,不能因为目前保健食品的泛滥无度和虚夸不实而忽视这一趋势。除确定可食性动植物的营养价值外、用化学方法研究有预防性药理作用的成分,包括无营养价值但有活性的成分,显然是重要的。利用化学和生物的方法增加动植物食品的防病有效成分,提供安全有疾病预防作用的食物和食品添加剂(特别是抗氧化剂),改进食品储存加工方法,以减少不安全因素,保持有益成分等,都是化学研究的重要内容。

2. 化学在能源和资源的合理开发和高效安全利用中起关键作用

经过 20 世纪竭泽而渔的开采以后,人们开始意识到能源的开采和利用必须基于国情,贯彻可持续性发展的原则。虽然在 21 世纪初期,我国重点能源仍然为煤炭(包括煤层气转化)、天然气和石油等化石能源。但上述这些不可再生的能源将在 100 年后变得稀缺,故必须提早节约和保存,并为后代作好利用新能源的准备,况且上述能源已经成为 20 世纪人类影响环境的主要因素。因此,必须建立适合我国国情的、有步骤的开发利用能源的计划。

第一,要研究高效洁净的转化技术和控制低品位燃料的化学反应,使之既能保护环境又能降低能源的成本。这不仅是化工问题,也有基础化学问题。例如,要解决煤、天然气、石油的高效洁净转化,就要研究它们的组成和结构、转化过程中的反应,研究高效催化剂,以及如何优化反应条件以控制过程等。

第二,要开发新能源,新能源必须满足高效、洁净、经济、安全的要求。利用太阳能以及新型的高效、洁净化学电源与燃料电池都将成为 21 世纪的重要能源。除去已经有研究基础和生产经历的上述能源外,从基本上寻找更新型的能源(例如,天然气水化合物)的工作不可忽视。而这些研究大多数要从化学基本问题做起,即研究有关的理论与技术。

矿产资源也是不可再生的。如何合理使用同样事关重大。例如,稀土是战略物资。我国稀土矿物储量丰富,为世界所瞩目。但是我们面临稀土资源的浪费:一方面出口原料和粗制品,进口产品和精制品;另一方面在国内使用上仍然停留在“粗用”水平,将粗加工的混合稀土加入肥料,大量撒在耕地、林区中,造成资源浪费。保护稀土矿藏和精细加工利用为大势所趋,这要依靠深入研究稀土的分离和深加工,研究稀土的精细利用,研究开拓各种稀土化合物的特种功能和应用等。在其他矿产资源中,盐湖资源和土地资源等都应该做更深的基础研究,寻找发挥更高层次的作用。例如,法国用天然膨润土制作成为药物(国内商品名思密达),顿时身价百倍。

3. 化学继续推动材料科学发展

各种结构材料和功能材料与粮食一样永远是人类赖以生存和发展的物质基础。在满足人类衣食住行基本需求之后,为提高生存质量和安全,为可持续发展,不断提出新材料的要求。新材料研究已经是物质科学的研究重点,未来会更加发展扩大。化学是新材料的“源泉”,任何功能材料都是以功能分子为基础。发现具有某种功能的新型结构会引起重要突破。回顾以往卟啉、茂金属化合物、冠醚以及后来的富勒烯的研究都是如此。但还要看到以往功能材料化学研究的历史特点,往往新型功能结构的发现是偶然的,但一经发现,再扩展研究,比较有章可循,容易成为大家争先恐后(研究)的热点。于是在高潮之中,不可避免盲目性、重复性

以及低水平工作。总结经验,今后的研究必须减少盲目性和低水平重复,要重视通过总结结构—性质—功能关系设计和寻找新材料。

最初化学家研究材料主要是用合成—筛选模式寻找功能分子。后来,利用构磁关系在寻找新药和新农药方面有了较大的进展。基于化合物物理性质的定量构—效关系已是引人入胜,很快量子化学和分子力学又借高功能计算机进入分子设计,于是计算机辅助设计一步一步地使分子设计更加合理。但是药物和农药是主要以活性分子的结构为基础的,设计的仅仅是分子的结构。故对于大多数功能材料来说,一个分子即便具有某种性质和功能,但还不是材料。作为材料必须有 3 个层次的结构因素,即分子结构决定其有潜在的功能;分子以上的有序结构决定其具有可表现的功能;而构筑成材料的外形决定其具有某种特定有效的功能。例如,贝壳的基本性质由构成它的文石(碳酸钙)和多糖基质的结构决定,但是二者通过有序组装构成的复合材料决定了它的基本材料性质。而且只有当这种材料构成一定形状的壳状结构时,它才能起贝壳的作用。同样是碳酸钙和多糖基质构成的蛋壳就因为有不同的组装方式和不同外形而有不同功能。与之相似,有催化活性的化合物不是催化剂;有非线性光学性质的物质不是非线性光学材料。作为材料,必须要有分子结构和性能的基础,但是还要重视由功能分子组装成具有特定功能的材料这重要的一步。过去的功能材料研究,物理学和生物学只重视研究功能,而化学只做到合成有功能的分子,两个方面都很少考虑材料的结构。从超导体、半导体,到催化剂载体、药物控释载体,都需要从根本上研究材料的结构。化学可以从分子结构和高级结构两个层次上研究结构与功能的关系,从而提出分子设计和材料设计的指导思想。除多层次结构决定材料功能以外,还将注意材料的超微尺度问题。超微尺度的化学包括:超微尺寸的凝聚态和分散系的特殊行为,以及宏观物体中的超微结构与功能的关系。过去化学已注意到分散系中的纳米级分散相和细微分散颗粒的化学性质不同于宏观物体。近年来,物理学提出了纳米尺度介观效应,并从理论上加以诠释,从而使超微尺度的化学会具有了更宽的内涵。

在现今社会,探求特定结构的形成规律和方法,包括合成、组装和构筑是一个广阔的研究领域。

以往合成的材料自然也有高级结构,不过那是自发形成的。如何按照要求设计高级结构?这是要求化学家们深入探索的问题。生物材料具有独特的分子组成和高级结构,因此具有独特的性能,模仿天然材料的高级结构是一条目前可以探索的途径。

例如,人们已经在模拟沸石结构合成分子筛方面取得很大成就,并开发了许多催化剂载体。未来化学在研究仿生功能材料中将越来越重要。值得注意的是,仿生材料研究已经经历了两个阶段,如以模拟骨的生物矿物材料为例,首先是模仿组成,如磷灰石生物陶瓷以及磷灰石加胶原蛋白的复合材料;后来注意到复合材料不是混合材料,必须模拟其结构,于是用材料学方法制备有复合结构的材料。直到最近,人们开始意识到更重要的是模拟生物材料形成过程,预计今后在生物矿化的模拟研究上会有所突破。

像酶这样的生物催化剂也会成为未来发展的重点。20 世纪只是模拟酶的活性中心。例如,模拟超氧化物歧化酶活性中心,合成—筛选了许多铜的配合物,但是距离酶的特异性和高效性很远。人们意识到决定酶全面功能的不仅仅是活性中心,还在于活性中心以外的其他结构部分。可用于生产、生活、医疗的模拟酶在 21 世纪将会有所突破,而突破是基于构筑既有活性中心又有保证活性功能的高级结构的化合物。

电子—信息技术将在 21 世纪以更快的速度发展,这就要求化学家作出更大的努力。回顾

20 世纪电子信息技术的发展历程,经历了由电子管到半导体、到集成电路、再到大规模集成电路等几个阶段。在每个阶段中,化学家创造了必需的材料,诸如早期的单晶硅、半导体材料、光刻胶等,以及后期的液晶及其他显示材料、信号储存材料、电致发光材料、光导材料、光电磁记录材料、光导纤维材料和技术等,这些都推动了电子信号技术的发展。21 世纪电子信息技术将向更快、更小、功能更强的方向发展。

目前大家正致力于量子计算机、生物计算机、分子电路、生物芯片等新技术,即标志着进入“分子信息技术”阶段。这需要物理学家提供器件设计思路,化学家则设计、合成所需的物质和材料。可以想象未来各国之间信息科学的领先地位之争会异常猛烈。依靠外国的技术和材料不可能领先于别人。领先一靠创新思路,二靠实现新思路的物质基础。有时并不一定先有思路,后造材料;也可能先发现独特性能的材料,后形成思路。所以化学家应该更加主动地研究各种与电子信息有关的材料的性质和功能以及与各层次结构的关系,特别是物质与能的相互作用的化学特征;进一步吸收其他学科提出的新思路 and 概念,将化学理论和概念融合进去,创造具有特殊功能的新物质和新材料。此外,化学必须推进凝聚态化学的研究,如纳米科学技术、超分子凝聚态构筑、晶体工程等,以创造新的聚集态构筑技术。

4. 化学是提高人类生存质量和生存安全的有效保障

化学在保证人类的生存并不断提高人类的生活质量方面起着重要的作用。利用化学生产化肥和农药,以增加粮食的产量;利用化学合成药物,以抑制细菌和病毒,保障人体健康;利用化学开发新能源和新材料,以改善人类的生存条件;利用化学综合应用自然资源和保护环境,以使人类生活得更加美好。

六、如何学好化学原理?

1. 主动学习

学习可以分为主动和被动两种学习方式。主动学习是指学生主动地思考所学知识、主动地发现自己尚未理解的问题、主动地寻求解答问题,以及主动地预习和复习课堂讲授内容。被动学习是指学生被动地接受知识,被动地等待教师来发现自己的问题,被动地等待答案等。通常人们相信主动学习的同学对所学内容会有比较好的理解,也更有可能获得好成绩。

2. 预习和复习

课前浏览一遍下一节课将要讲到的内容和重要的概念是一个很好的学习习惯,因为这样可以帮助学生了解课堂教学的重点,使学生更加关注于重点问题或自己不太理解的问题,从而提高课堂的学习效率。故建议学生在课后的当天复习课堂内容。因为拖延复习可能导致遗忘某些关键内容,造成学生对一些课堂知识难以理解。在复习中,学生应依据课堂笔记,同时借助教材和参考书,把所学知识贯穿起来,并检验自己是否能独立应用所学原理解决问题。

3. 课堂注意听讲

课堂学习是学好本门课程的关键。由于教师的教学内容与教材不完全相同,因此课堂学习是获取一些重要知识的关键途径。在课堂上应保持安静,思想集中,认真做笔记。课堂笔记不应当是事无巨细地记录老师的每一句话,而应当是记下老师讲课的重点和教材上没有的内容。课堂笔记是复习考试时的重要参考,因此一份条理清晰、简明扼要的笔记对于同学们最后

获得好成绩非常重要。

4. 课后练习

俗话说“不到水里就学不会游泳”，因此，习题演练对于掌握所学知识非常重要。课后作业就是帮助学生们掌握关键学习内容的重要手段。每当同学们发现自己不会做某道习题时，就表明对某些基本概念还未完全领会。这时就应当复习相应内容，重新理解所学内容。当学生在某一道习题上“卡壳”时，应当立即向其他同学或老师寻求帮助。

5. 学习小组

根据以往的经验，我们建议同学们可以自由组成3~6人的学习小组。在小组内讨论学习上遇到的问题，交换学习经验。由于每个人知识背景的不同、看问题的出发点不同，因此小组学习有助于同学们开阔思路，练习与他人沟通的有效方法，且每个小组成员都可从中受益。

6. 融会贯通

认知心理学认为，增强理解能力和记忆力的最有效方法是在所学知识之间建立联系。因此，学生在学习中应当有意识地打通所学知识之间的联系，学会用自己以前的知识来解释新学到的知识。这种方法也是检验自己是否真正理解课堂内容的一个有效途径。如果同学在理解过程中遇到困难，可以向老师寻求帮助。

7. 有效地管理个人时间

每个人的时间都是相同的，但是学习效率却因人而异。所以能否有效地管理时间、提高学习效率是能否获得大学阶段成功的关键。而有效利用时间的关键是在学习中保持注意力（而不是拖长学习的时间）。我们希望每一位同学都能在学习中掌握有效的学习方法。

8. 认真准备考试

考试的内容就是老师的授课内容。当然，这不是说记住老师的每一句话就可以得满分。考试通常强调学生对所学原理和概念的理解，以及学生是否会应用这些概念来解决实际问题。在平时和考试复习期间，同学们应当认真归纳总结所学过的概念、公式和定理，应当勤做练习题来检查自己是否已经真正理解所学内容。我们反对学生在考前“临阵磨枪”的做法，因为这样很难达到真正理解，并很容易在考试中失败。

七、科学方法论

科学方法论是“自然科学方法论”的简称。它既是马克思主义认识论的具体体现，又是对各门自然科学认识方法的概括和总结。它所涉及的观察、实验、测定、数据处理、分类、提出假说、验证假说、得出结论等步骤，正体现了化学研究方法的一般规律。所以，科学方法论是正确认识化学知识的重要理论依据，又是培养解决化学问题能力的基本途径和步骤。

八、科学计算——有效数字

1. 有效数字及其位数

有效数字是指实际能测量得到的数字。一个数据中的有效数字包括所有确定的数字和最

后一位不确定的数字。

有效数字即保留末尾一位为可疑数值,其他均为有效数字。如 24.34 的有效数字是 4 位,最后一位“4”是可疑值。

2. “0”在数值的作用

“0”在数值中有 3 种作用,即有效(定值)、定位(无效)、不确定。

(1)有效(定值)作用

当“0”在小数点后,而小数点前为非“0”时,“0”为有效(定值)作用。如 1.000 为 4 位有效数字;1.0002 为 5 位有效数字。

(2)定位(无效)作用

当“0”在小数点后、又在数字之前,而小数点前为“0”时,“0”为定位(无效作用)如 0.00241 为 3 位有效数字,2 之前的“0”均为定位作用;0.02040 为 4 位有效数字。

(3)不确定作用

当“0”在整数位后时,其表示的位数是不确定的。如 2400 的有效位数是不确定的,用 3 位有效数字表示时为 0.240×10^4 、 0.00240×10^6 ;用 2 位有效数字表示时为 0.24×10^4 、 0.0024×10^6 。

3. 数据修约

	修约前	修约后(保留至小数点后一位数)
四舍六入五考虑	12.44	12.4
五后为零看前位	12.46	12.5
五前为奇要进一	12.35	12.4
五前为偶要舍弃	12.45	12.4
五后非零要进一	12.451	12.5

4. 有效数字的运算规则

- ①记录测量数值时,只保留一位可疑数字。
- ②当有效数字位数确定后,其余数字应一律舍弃,舍弃办法为采取“四舍六入五留双”的规则。
- ③加减法。几个数据相加或相减时,它们的和或差的有效数字的保留,应以小数点后位数最少的数字为准。
- ④在乘除法中,有效数字的保留应以有效数字位数最少的为准。
- ⑤分数和倍数的计算,分数和倍数是非测量值,为无限位数有效数字。