

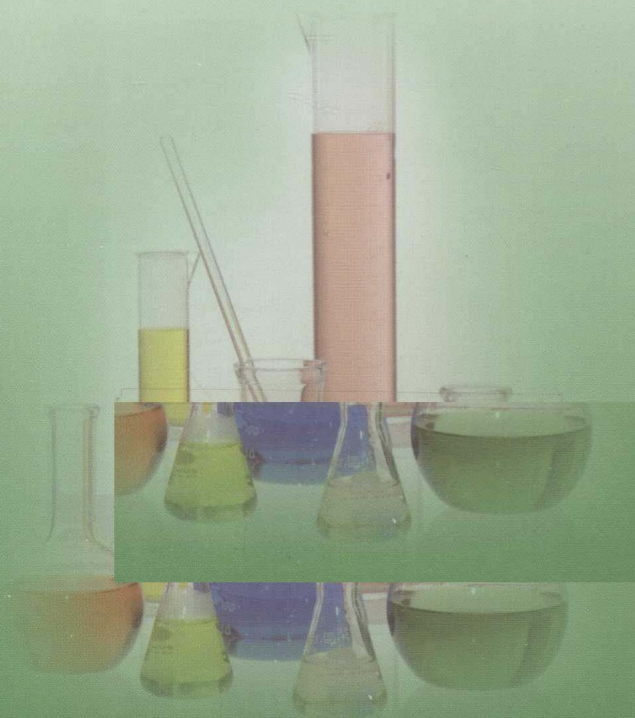


高等院校“十一·五”规划教材

基础化学

杨立静 主编

曹东杰 郑艳芬 张春梅 副主编



中国石化出版社

[HTTP://WWW.SINOPEC-PRESS.COM](http://www.sinopec-press.com)

高等院校“十一五”规划教材

基 础 化 学

杨立静 主 编
曹东杰 郑艳芬 张春梅 副主编

中国石化出版社

内 容 提 要

本书将无机化学、有机化学整合在一起。全书分为无机化学和有机化学两部分。无机化学内容部分包括物质结构、化学反应原理、胶体和溶液化学平衡的知识,并将重点放在四大平衡中。有机化学内容部分在编写中大幅度降低了基础理论知识的难度,删除了“反应历程”、“反应机理”、“对映异构”等内容,增加了“重要的物质”这部分内容,尤其是与环境、食品等有关的有机化合物的介绍,突出了实用性。

本教材紧扣化学基础知识、基本理论和基本技能,在内容深度和广度上注意与后续专业课的衔接。本书适用于高职院校化工、农林、医药卫生等专业,也可作为专科层次其他相关专业的教材和参考书。

图书在版编目(CIP)数据

基础化学 / 杨立静主编. —北京:中国石化出版社,
2010.7
高等院校“十一五”规划教材
ISBN 978-7-5114-0456-5

I. ①基… II. ①杨… III. ①化学-高等学校:技术
学校-教材 IV. ①06

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 118869 号

未经本社书面授权,本书任何部分不得被复制、抄袭,或者以任何形式或任何方式传播。版权所有,侵权必究。

中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

读者服务部电话:(010)84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail:press@sinopec.com.cn

北京科信印刷厂印刷

全国各地新华书店经销

*

787×1092 毫米 16 开本 19.75 印张 488 千字

2010 年 7 月第 1 版 2010 年 7 月第 1 次印刷

定价:40.00 元

《基础化学》编委会名单

主 编 杨立静

副主编 曹东杰 郑艳芬 张春梅

编 者(以姓氏笔画为序)

全玉莲(中国环境管理干部学院)

石碧清(中国环境管理干部学院)

马建华(承德石油高等专科学校)

刘 军(中国环境管理干部学院)

郑艳芬(中国环境管理干部学院)

张春梅(华北煤炭学院秦皇岛分院)

陈凯立(中国环境管理干部学院)

杨立静(中国环境管理干部学院)

赵 育(中国环境管理干部学院)

翁爱国(河北省卢龙县第一中学)

曹东杰(中国环境管理干部学院)

前 言

本教材根据环境专业教育教学计划 and 教学大纲的要求,以实用和够用为基本原则,注重反映相关学科发展前沿动态,可供环境监测、环境工程、环境管理、环境监察、生态环境保护及食品类等有关专业学生使用。

基础化学是环境、生态、食品类等相关专业的重要专业基础学科。本教材在编写过程中,始终贯彻国家教育部关于“全面推进素质教育,深化职业教育教学改革的意见”的精神,围绕职业教育培养目标,树立以全面素质为基础,以能力为本位的指导思想,注重教学内容的提炼,编写模式的创新,强化知识的实践运用和专业能力的训练。

本教材紧扣化学基础知识、基本理论和基本技能,在内容深度和广度上注意与后续专业课的衔接。全书分为无机化学和有机化学两部分,其中无机化学部分有8章内容,有机化学部分有13章内容。

无机化学内容部分在编排上打破了传统的模式,把原子结构、分子结构和晶体结构等内容列入第一章物质结构内容中,第二、三章介绍化学反应原理(化学动力学基础、化学热力学基础),第四、五、六、七、八章介绍胶体和溶液化学平衡的知识,并将重点放在四大平衡中。

有机化学内容部分在编写中大幅度降低了基础理论知识的难度,删除了“反应历程”、“反应机理”、“对映异构”等内容,增加了“重要的物质”这部分内容,尤其是与环境、食品等有关的有机化合物的介绍,突出了实用性。

另外,为了拓宽学生的知识面,该书还增加了“知识链接”这部分内容。突出化学知识在生态环境和能源问题等方面的应用,作为教材正文的补充,起到了提高学生兴趣,扩大知识面的作用。

本教材无机化学部分第一章由曹东杰、石碧清编写,第二章由郑艳芬、金玉莲编写,第三、八章由郑艳芬编写,第四、六章由曹东杰编写,第五章由郑艳芬、石碧清编写,第七章由曹东杰、金玉莲编写。有机化学部分第一、五、六、七章由杨立静编写,第三、四章由马建华、杨立静编写,第二章由杨立静、陈凯立编写,第八章由刘军、张春梅编写,第九、十、十一章由张春梅编写,第十二、十三章由张春梅、赵育编写。本教材有机化学部分特聘请河北师范大学化学系王兰芝教授主审。

在编写过程中,参考了部分高等院校的有关教材,并得到了本书各编者所在单位领导的关心和支持,在此一并表示衷心的感谢。

由于编者水平和编写时间所限,错误和缺点在所难免,恳请各位同仁和广大读者批评指正。

编者

目 录

第一篇 无机化学

第一章 物质结构基础	(1)
第一节 原子结构	(1)
一、微观粒子的运动特征	(1)
二、原子结构	(2)
三、原子核外电子的排布	(5)
四、原子的电子排布和元素周期表	(8)
五、元素性质的周期性	(9)
第二节 化学键和分子结构	(12)
一、离子键	(12)
二、共价键	(13)
三、杂化轨道理论和分子的空间构型	(15)
第三节 分子的极性、分子间作用力和氢键	(17)
一、分子的极性	(18)
二、分子间力	(18)
三、氢键	(19)
四、分子间力和氢键对物质性质的影响	(20)
第四节 晶体结构	(20)
一、晶体的特征	(20)
二、晶体的基本类型	(21)
第二章 化学热力学基础	(26)
第一节 化学热力学基本概念	(26)
一、基本概念和常用术语	(26)
二、热力学第一定律	(28)
第二节 化学反应的反应热和焓	(28)
一、恒容反应热	(28)
二、恒压反应热和焓	(28)
三、热化学方程式	(29)
四、盖斯(Hess)定律	(30)
五、反应标准摩尔焓变的计算	(30)
第三节 化学反应的方向	(31)
一、自发过程与自发反应	(31)
二、影响化学反应方向的因素	(32)

三、反应自发性的判断	(33)
第三章 化学反应速率和化学平衡	(41)
第一节 化学反应速率	(41)
一、化学反应速率	(41)
二、化学反应速率理论简介	(42)
三、影响化学反应速率的因素	(43)
第二节 化学平衡	(46)
一、可逆反应和化学平衡	(46)
二、化学平衡常数	(47)
三、平衡常数与吉布斯自由能变	(48)
四、化学平衡的移动	(49)
五、吕·查德里原理——平衡移动的一般规律	(51)
第四章 气体、溶液和胶体	(55)
第一节 气体	(55)
一、理想气体状态方程	(55)
二、分压定律	(55)
第二节 分散体系	(56)
一、分散体系的概念	(56)
二、分散体系的分类	(56)
第三节 溶液	(56)
一、溶液浓度的表示方法	(56)
二、稀溶液的依数性	(57)
第四节 胶体分散体系	(60)
一、溶胶的性质	(60)
二、溶胶的胶团结构	(61)
三、溶胶的稳定性与聚沉	(61)
第五章 酸碱平衡	(66)
第一节 酸碱质子理论	(66)
一、酸碱的定义	(66)
二、酸碱电离理论	(66)
三、酸碱质子理论	(66)
第二节 弱酸、弱碱的电离平衡	(67)
一、弱酸、弱碱的电离平衡常数	(67)
二、水的离子积	(68)
三、溶液的酸碱性和 pH	(68)
第三节 酸碱溶液 pH 的计算	(69)
一、一元弱酸溶液 pH 的计算	(69)
二、多元弱酸溶液 pH 的计算	(70)

三、一元弱碱溶液 pH 的计算	(70)
第四节 同离子效应和缓冲溶液	(72)
一、同离子效应	(72)
二、缓冲溶液	(72)
第六章 沉淀 - 溶解平衡	(80)
第一节 沉淀 - 溶解平衡	(80)
一、沉淀 - 溶解平衡	(80)
二、溶度积常数	(80)
三、溶度积与溶解度	(80)
四、溶度积规则	(82)
第二节 沉淀的生成与分步沉淀	(82)
一、沉淀的生成	(82)
二、分步沉淀	(83)
第三节 沉淀的溶解与转化	(85)
第七章 原电池与金属腐蚀	(89)
第一节 氧化还原反应及其方程式的配平	(89)
一、氧化数	(89)
二、氧化还原反应及其方程式的配平	(89)
第二节 原电池	(90)
一、原电池	(90)
二、电极电势	(91)
第三节 电极电势的应用	(96)
一、判断电池反应的方向, 计算原电池的电动势	(96)
二、比较氧化剂和还原剂的相对强弱	(96)
三、判断氧化还原反应的方向	(97)
四、判断氧化还原反应进行的程度	(97)
第四节 金属腐蚀与防护	(98)
一、金属腐蚀的分类	(98)
二、金属腐蚀的防护	(99)
第八章 配位化合物	(103)
第一节 配位化合物的组成、分类和命名	(103)
一、配位化合物和配位反应	(103)
二、配位化合物的组成	(103)
三、多齿配体和螯合物	(104)
四、配合物的命名	(106)
第二节 配位平衡	(107)
一、配合物的解离平衡	(107)
二、配离子的解离常数	(107)

第二篇 有机化学

第一章 绪论	(112)
第一节 有机化合物概述	(112)
一、有机化合物的概念	(112)
二、有机化合物的性质特点	(112)
三、有机化合物的结构特点	(113)
第二节 有机化合物分子中的电子效应和有机化学反应类型	(113)
一、电子效应	(113)
二、共价键的断裂和有机反应类型	(114)
三、分子间力	(115)
第三节 有机化合物的分类	(115)
一、按碳架分类	(115)
二、按官能团分类	(116)
第二章 烷烃	(119)
第一节 烷烃的命名	(119)
一、伯、仲、叔、季碳原子和伯、仲、叔、季氢原子	(119)
二、烷基的命名	(119)
三、烷烃的命名	(120)
第二节 烷烃的同分异构现象	(122)
一、烷烃的构造异构	(123)
二、烷烃的构象异构	(124)
第三节 烷烃的性质	(125)
一、烷烃的物理性质	(125)
二、化学性质	(126)
三、烷烃的来源	(128)
第三章 不饱和烃	(133)
第一节 烯烃	(133)
一、烯烃的同分异构现象	(133)
二、烯烃的命名	(134)
三、烯烃的物理性质	(136)
四、烯烃的化学性质	(137)
第二节 二烯烃	(141)
一、二烯烃的分类和命名	(141)
二、共轭二烯烃的结构	(141)
三、共轭二烯烃的化学性质	(142)
第三节 炔烃	(143)
一、炔烃的命名	(143)

二、炔烃的物理性质	(143)
三、炔烃的化学性质	(144)
第三节 重要的不饱和烃	(146)
一、乙烯	(146)
二、丙烯	(146)
三、乙炔	(147)
四、1, 3-丁二烯	(147)
第四章 脂环烃	(150)
第一节 脂环烃的分类	(150)
第二节 单环环烷烃	(151)
一、单环环烷烃命名	(151)
二、环的张力及环己烷的构象	(152)
三、单环环烷烃的性质	(153)
四、重要的环烷烃	(154)
第五章 芳香烃	(158)
第一节 芳烃的分类和结构	(158)
一、芳烃按其结构分类	(158)
二、苯的结构	(158)
第二节 单环芳烃	(159)
一、单环芳烃的命名	(159)
二、单环芳烃的物理性质	(161)
三、单环芳烃的化学性质	(161)
第三节 苯环上取代反应的定位规则	(165)
一、定位基的分类	(166)
二、定位规则	(166)
第四节 稠环芳烃	(167)
一、萘	(167)
二、蒽和菲	(168)
第五节 几种重要的单环芳烃	(169)
一、苯	(169)
二、甲苯	(170)
三、二甲苯	(170)
四、苯乙烯	(170)
五、异丙苯	(171)
第六章 卤代烃	(174)
第一节 卤代烃的分类和命名	(174)
一、卤代烃的分类	(174)
二、卤代烃的命名	(174)

三、同分异构现象	(175)
第二节 卤代烷烃	(176)
一、卤代烷烃的物理性质	(176)
二、卤代烷的化学性质	(176)
第三节 卤代烯烃与卤代芳烃	(180)
一、卤代烯烃与卤代芳烃的结构	(180)
二、卤代烯烃与卤代芳烃的性质	(181)
第四节 其他卤代烃	(182)
一、有机氟化物	(182)
二、多卤代烃	(182)
第五节 重要的卤代烃	(182)
一、氯仿(CHCl_3)	(182)
二、碘仿(CHI_3)	(183)
三、氟利昂	(183)
四、四氟乙烯	(183)
第七章 醇、酚、醚	(186)
第一节 醇	(186)
一、醇的结构、分类和命名	(186)
二、醇的物理性质	(188)
三、醇的化学性质	(190)
四、重要的醇	(194)
第二节 酚	(196)
一、酚的命名	(196)
二、酚的物理性质	(197)
三、酚的化学性质	(198)
四、重要的酚	(200)
第三节 醚	(201)
一、醚的分类和命名	(201)
二、醚的物理性质	(202)
三、醚的化学性质	(203)
四、重要的醚	(204)
第八章 醛、酮、醌	(208)
第一节 醛、酮	(208)
一、醛、酮的分类和命名	(208)
二、醛、酮的物理性质	(209)
三、醛、酮的化学性质	(210)

四、重要的醛和酮	(216)
第二节 醌	(217)
一、醌的结构和命名	(217)
二、醌的性质	(218)
三、重要的醌	(219)
第九章 羧酸及其衍生物	(223)
第一节 羧酸	(223)
一、羧酸的分类和命名	(223)
二、羧酸的物理性质	(224)
三、羧酸的化学性质	(225)
四、重要的羧酸	(228)
第二节 取代酸	(229)
一、羟基酸	(229)
二、酮酸	(231)
三、重要的取代酸	(232)
第三节 羧酸衍生物	(233)
一、羧酸衍生物的命名	(233)
二、羧酸衍生物的性质	(234)
三、重要的羧酸衍生物	(237)
第十章 含氮有机化合物	(239)
第一节 硝基化合物	(239)
一、硝基化合物的分类和命名	(239)
二、硝基化合物的物理性质	(239)
三、硝基化合物的化学性质	(240)
四、重要的硝基化合物	(242)
第二节 胺	(242)
一、胺的分类和命名	(242)
二、胺的物理性质	(244)
三、胺的化学性质	(244)
第三节 芳香族重氮和偶氮化合物	(248)
一、芳香重氮盐的反应	(248)
二、重要的重氮化合物——重氮甲烷	(249)
三、偶氮化合物	(249)
第十一章 杂环化合物	(253)
第一节 杂环化合物的分类、命名	(253)
一、杂环化合物的分类	(253)
二、杂环化合物的命名	(254)
第二节 五元杂环化合物	(254)
一、吡咯、噻吩和咪唑	(254)
二、其他重要的五元杂环化合物及其衍生物	(257)

第三节 六元杂环化合物	(260)
一、吡啶	(260)
二、其他重要的六元杂环化合物及其衍生物	(262)
第四节 生物碱	(264)
一、生物碱的化学性质	(265)
二、重要的生物碱	(265)
第十二章 糖类	(268)
第一节 单糖	(268)
一、单糖的结构	(268)
二、单糖的物理性质	(270)
三、单糖的化学性质	(270)
四、重要的单糖	(272)
第二节 二糖	(273)
一、麦芽糖	(274)
二、乳糖	(274)
三、蔗糖	(275)
第三节 多糖	(275)
一、淀粉	(276)
二、糖原	(277)
三、纤维素	(277)
第十三章 氨基酸和蛋白质	(280)
第一节 氨基酸	(280)
一、氨基酸的分类和命名	(280)
二、氨基酸的结构	(282)
三、 α -氨基酸的性质	(282)
第二节 蛋白质	(285)
一、蛋白质的元素组成和分类	(285)
二、蛋白质构型	(285)
三、蛋白质的性质	(287)
附录1 我国法定计量单位	(292)
附录2 基本物理常数	(294)
附录3 某些物质的标准生成焓、标准生成吉布斯自由能, 标准熵(25℃)	(295)
附录4 国际原子量表	(299)
附录5 元素周期表	(302)
参考文献	(303)

第一篇 无机化学

第一章 物质结构基础

当今环境污染日益严重，造成环境污染的因素很多，而由化学物质引起的污染占80% ~ 90%。这些污染物种类繁多，表现出不同的宏观性质，其根本原因在于物质微观结构的差异。结构化学是在原子、分子水平上，深入到电子层次，研究物质的微观结构及其与宏观性质之间关系的科学。学习原子结构、化学键和晶体结构的基本理论和知识，对于掌握物质的性质及其变化规律，分析污染物质在环境中的迁移、转化规律，进而提出相应的治理措施，具有重要的意义。

第一节 原子结构

一、微观粒子的运动特征

人们对微观粒子的运动规律的认识，经历了一个长期、艰苦的探索与发展过程。19 世纪初，道尔顿提出了原子学说，认为元素的最基本组成是原子，奠定了现代化学的基础。1897 年，汤姆逊发现了电子，打开了认识原子内部结构的大门。1911 年，英国物理学家卢瑟福提出了原子的有核模型：每个原子中心都有一个带正电荷的原子核，集中了几乎全部的原子质量，核外有若干个带负电荷的电子绕核运动。20 世纪初，人工核裂变实验发现原子核是由质子和中子组成。质子带正电荷，电量与一个电子带的负电荷量相等，中子不带电。随后，玻尔引入量子化条件，在卢瑟福原子结构模型的基础上提出了玻尔原子模型。指出原子中电子运动的轨道是分层次的，是以核为圆心的不同半径的同心圆。在不同轨道上运动的电子能量是不连续的，即能量量子化。由此解释原子发射光谱是分立的线状光谱而不是连续光谱，原子能够稳定存在等客观事实。但是玻尔原子结构模型也存在很大的局限性，它基本上仍沿用了牛顿经典力学为基础的理论框架，只是人为地加上量子化条件，以此来描述原子中电子的运动规律，没有真正涉及微观粒子的运动本质。20 世纪 20 年代以后，以微观粒子的波粒二象性为基础发展起来的现代量子力学，正确地描述了电子、原子、分子等微观粒子的运动规律，奠定了现代物质结构理论的基础。

1. 微观粒子的量子化特征

微观粒子运动遵循量子力学规律，与经典力学运动规律不同的重要特征是“量子化”。“量子化”是指微观粒子的运动及运动过程中能量的变化是不连续的，而是以某一最小量为单位呈现跳跃式的变化。

“量子化”这一重要概念是普朗克于 1900 年首先提出的。他根据黑体辐射实验的结果，提出能量的传递与变化是不连续的，是量子化的。这一革命性的科学假说后来发展为量子论。普朗克把能量的最小单位称为能量子，简称量子，以光或辐射形式传递的能量子具有的

能量与辐射的频率成正比:

$$\varepsilon = h\nu$$

式中, $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, 称为普朗克常数。

2. 波粒二象性

1905 年, 爱因斯坦的光子学说成功地解释了光电效应, 使光的微粒性为人们所接受。光在传播时的干涉、衍射等现象, 表现出光的波动性。受光的波粒二象性的启发, 1924 年德布罗依提出了分子、原子、电子等微观粒子也具有波粒二象性的假说。对于质量为 m 、以速度 v 运动着的微观粒子, 不仅具有动量 $p = mv$ (粒子性特征), 也具有相应的波长 λ (波动性特征)。两者之间的相互关系符合下列关系式:

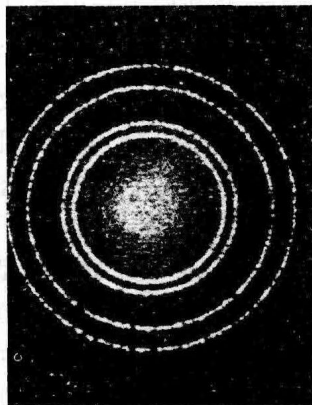
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

这就是著名的德布罗依关系式, 它把物质微粒的波动性和粒子性联系在一起。式中的 λ 称为物质波的波长, 或德布罗依波长。

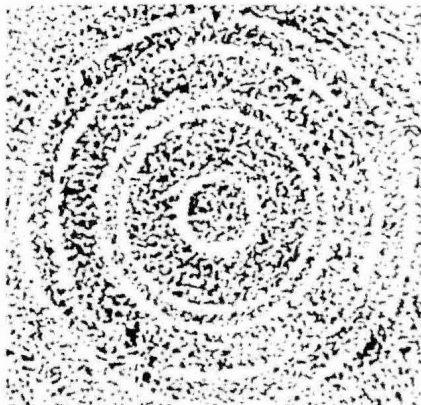
根据德布罗依关系式, 可求得电子的波长。例如, 以 $1.0 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的速度运动的电子, 其德布罗依波波长为:

$$\lambda = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{(9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}) \times (1.0 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})} = 7 \times 10^{-10} \text{ m}$$

这个波长相当于分子大小的数量级。因此, 当一束电子流经过晶体时, 应能观察到由于电子的波动性引起的衍射现象。1927 年, 美国科学家戴维逊等人用电子衍射实验证实了德布罗依的假说(图 1-1)。



(a) 电子衍射图片



(b) 电子衍射示意图

图 1-1 电子衍射示意图

二、原子结构

1. 波函数和原子轨道

由于一切微观粒子都具有波粒二象性, 因而原子中的电子运动也具有波粒二象性。1926 年奥地利物理学家薛定谔从电子的波粒二象性出发, 参照电磁波的波动方程, 提出了描述微观粒子运动规律的波动方程, 称为薛定谔方程。

薛定谔方程是一个二阶偏微分方程。解薛定谔方程, 就可求出描述微观粒子(如电子)运动状态的数学函数式——波函数 $\psi(x, y, z)$ 及与此状态相应的能量 E 。

波函数是空间坐标的函数, 若确定了空间坐标, 波函数也就有了一定的数值。绘出波函数对应的空间坐标的图形, 便能形象地反映出电子在核外空间运动状态。通常把波函数 ψ

称为原子轨道。但应该注意,这里所称的原子轨道并不表示核外电子运动的固定轨道,是指核外电子运动的空间范围或区域,切忌将它和玻尔轨道的概念相混淆。

2. 四个量子数

薛定谔方程在数学上有很多解,但并不是每个解都能用来描述电子运动状态的合理波函数。为了使解得的波函数能够描述电子的空间运动状态,在求解薛定谔方程中,必须使某些常数的取值受到一定的限制,这些受限制的常数称为量子数。它们分别是主量子数 n 、角量子数 l 和磁量子数 m ,其取值是相互制约的。电子除绕核运动外,本身还具有自旋运动,因此,运用量子力学原理描述电子运动时,还必须引入一个描述电子自旋运动的量子数 m_s 。下面介绍这四个量子数的取值和物理意义。

(1) 主量子数(n) 表征原子轨道离核的远近,即通常所指的核外电子层的层数。 n 是决定原子轨道能级高低的主要因素,故称主量子数。 n 值越大,电子层数越多,电子离核越远,能量越高; n 值越小,电子层数越少,电子离核越近,能量越低。

主量子数 n 可取值 1, 2, 3……为自然数,共 n 个取值,分别称为第一电子层、第二电子层、第三电子层……主量子数可分别用相应的光谱符号来标记:

主量子数(n) 1 2 3 4 5 6 7 ...

光谱学符号 K L M N O P Q ...

(2) 角量子数(l) 表征原子轨道角动量的大小。 l 值与原子轨道的空间形状有关, l 值不同,轨道形状、电子云形状也不同。对于多电子原子,角量子数对其能量也产生影响,但不如 n 的影响大。当 n 相同时, l 值越大,电子的能量越高。通常把 n 相同而 l 不同的波函数 ψ 称为不同的电子亚层。

l 的取值: $l=0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$, 共 n 个取值。每个 l 值代表一个亚层。亚层可分别用相应的光谱符号来标记:

角量子数(l) 0 1 2 3 ...

光谱学符号 s p d f ...

(3) 磁量子数(m) 表征原子轨道角动量在外磁场方向上分量的大小。 m 值与原子轨道的空间伸展方向有关,它表示在同一角量子数下,电子亚层在空间可能采取不同的伸展方向。

m 的取值: $m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$ 之间的任何整数。

例如: $l=0, m=0$, 在空间无方向性,只有一个 s 轨道; $l=1, m=0, \pm 1$, 在空间有三种取向,三个轨道: p_x, p_y, p_z ; $l=2, m=0, \pm 1, \pm 2$, 在空间有五种取向,五个轨道: $d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2-y^2}, d_{z^2}$; $l=3, m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$, 在空间有七种取向,七个轨道。

在无外磁场下, n, l 相同, m 不同的原子轨道,其能量是相同的,称为简并轨道(又称为等价轨道)。

(4) 自旋量子数(m_s) 表征自旋角动量在外磁场方向上分量大小,即表征了自旋运动的取向。电子自旋只有顺时针和逆时针两种取向,故 m_s 的取值: $+1/2, -1/2$ 。

综上所述,原子中任何一个电子的运动状态,都要用四个量子数来确定,四者缺一不可。 n, l, m, m_s 四个量子数一定时,电子的运动状态就完全确定了。四个量子数与各电子层中可能存在的电子运动状态数,见表 1-1。

3. 原子轨道的图形

核外电子运动状态,即原子轨道 ψ 可由求解薛定谔方程得到其具体的函数表达式 $\psi_{n/m} = \psi(r, \theta, \phi)$ 。利用数学上的变量分离法,可将波函数 $\psi(r, \theta, \phi)$ 分解为两个独立函数的乘积:

表 1-1 核外电子运动可能存在的状态数

主量子数	电子层	原子轨道符号	原子轨道数	电子运动状态数
$n = 1$	K	1s	1	2
$n = 2$	L	2s 2p	1 3	8
$n = 3$	M	3s 3p 3d	1 3 5	18
$n = 4$	N	4s 4p 4d 4f	1 3 5 7	32
n			n^2	$2n^2$

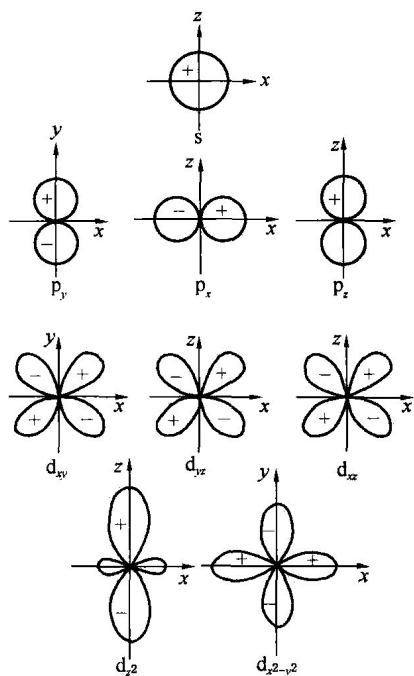


图 1-2 s、p、d 原子轨道的角度分布图的平面示意图

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi)$$

$R(r)$ 只随电子离核距离 r 变化, 与 θ 、 ϕ 无关, 即与轨道的空间取向无关, 称为波函数的径向部分; $Y(\theta, \phi)$ 只是 θ 、 ϕ 的函数, 与 r 无关, 即决定于轨道的空间取向, 与离核距离无关, 称为波函数的角度部分。

将波函数 ψ 的角度部分 $Y(\theta, \phi)$ 随角度 (θ 、 ϕ) 变化作图, 所得图像称为原子轨道角度分布图。

图 1-2 是常见 s、p、d 原子轨道的角度分布图。这些角度分布图实际上应为空间立体图, 但通常采用其平面投影图来表示。

原子轨道的径向分布图, 通常并不以 $R(r)$ 对 r 作图, 而是采用 $D(r) = r^2 R^2(r)$ 对 r 作图。 $D(r)$ 称为原子轨道的径向分布函数, 它表示在离核半径为 r 的球壳薄层中, 电子出现总概率随半径 r 的分布变化规律。图 1-3 是氢原子的各种状态的径向分布图。

4. 电子云和概率密度

波函数 ψ 本身没有直观、明确的物理意义。但 $\psi^2(r, \theta, \phi)$ 有明确的物理意义, 它表示核外电子在空间某位置单位体积内出现的概率大小, 称为电子在此空间位置上出现的概率

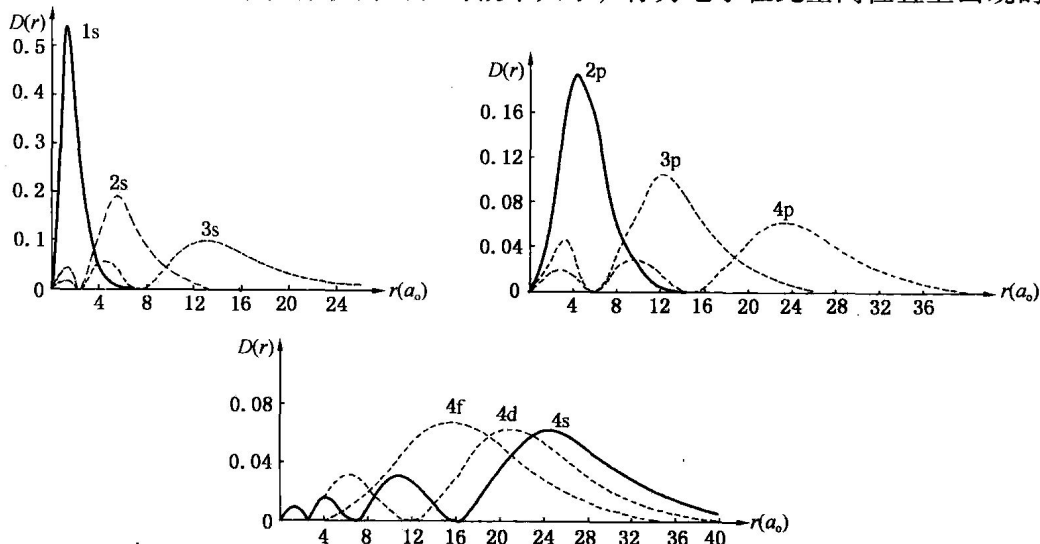


图 1-3 氢原子的各种状态的径向分布图