



科学版

学习指导系列

物质结构

陈启明

高剑南 编著

倪 行

学习指导

(第二版)



科学出版社

www.sciencep.com

科学版学习指导系列

物质结构学习指导

(第二版)

陈启明 高剑南 倪 行 编著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是在《物质结构学习指导》(科学出版社,1999)基础上修订而成。全书分8章,前加绪论。本书对第一版的章节结构稍作调整,每章的最后一节为自测题及答案,其余节由重要内容一览、内容提要与典型例题组成。全书突出结构决定性能、性能反映结构的学科思想,注意与中学化学教学的联系,使学生能在更高的层次上理解中学化学的内容。另外,增加专业英语词汇和英语自测题,为双语教学提供方便。

本书可作为高等师范院校和综合性大学物质结构(结构化学)课程的辅助教材,也可供专升本、函授及自学物质结构(结构化学)的读者阅读和参考。

图书在版编目(CIP)数据

物质结构学习指导/陈启明,高剑南,倪行编著. —2版. —北京:科学出版社,2010.1

科学版学习指导系列

ISBN 978-7-03-026389-6

I. ①物… II. ①陈…②高…③倪… III. ①物质结构-高等学校-教学参考资料 IV. ①O552.5

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 007350 号

责任编辑:杨向萍 陈雅娴 刘俊来 / 责任校对:刘小梅

责任印制:张克忠 / 封面设计:耕者工作设计室

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

源海印刷有限责任公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

1999年3月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2010年2月第 二 版 印张:21

2010年2月第 十 次 印刷 字数:423 000

印数:23 901—27 900

定价: 32.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

第二版前言

《物质结构学习指导》自 1999 年出版以来,被全国许多高等师范院校和一些综合性大学的师生选用,并且得到了广大读者的热情关注,在此我们表示衷心的感谢。考虑到这几年学科的迅猛发展,物质结构这门课程对于培养化学化工人才的重要性与日俱增,因此需要适时地修订《物质结构学习指导》一书。

本次再版做了如下几点修改:

(1) 全书仍分 8 章,前加绪论。对章节结构做了一些调整,将第一版中每节的自测题集中在这一章的最后,其余节则由重要内容一览、内容提要与典型例题组成。

(2) 突出结构决定性能、性能反映结构的学科思想。

(3) 注意与中学化学教学的联系,使学生能在更高的层次上理解中学化学的有关内容。

(4) 增加专业英语词汇和英语自测题,为双语教学提供方便。

在本书修订过程中,华东师范大学戴立益教授提出了很多宝贵的意见,在此表示诚挚的谢意。由于本学科的理论与应用发展异常迅速,而我们的水平与能力有限,尽管我们做了大量的工作,疏漏甚至错误之处仍然在所难免,恳请读者批评指正。

编 者

2009 年 9 月

第一版前言

物质结构(结构化学)是在原子、分子的水平上,深入到电子层次,研究物质的微观结构及其宏观性能关系的科学。1901年以来89次的诺贝尔化学奖中有关物质结构研究的获奖率处于第二位,仅次于生物化学,其内容涉及用量子力学原理与方法研究化学问题,进而建立物质结构理论;提出与创建结构分析新方法;剖析以生物大分子为主的复杂物质的结构。可见物质结构对于整个化学学科发展的重要作用。鉴于化学中很多重要的理论问题和测试方法都以物质结构的基本概念、基本理论和基本方法为基础,同时在指导中学化学教学方面的作用愈来愈突出,因此,物质结构成为化学专业的一门重要的基础理论课。

对于化学专业的本科生来说,学习物质结构不仅要明确“是什么”而且要理解“为什么”,并且将学到的物质结构知识转化成解决化学问题的能力。对于师范专业的本科生来说,不仅要知道“是什么”,理解“为什么”,而且要重视概念、理论的演变,善于将学术形态的物质结构知识转化成教育形态,用于中学化学教学及其研究。由于物质结构需要较多的数理知识、概念抽象,解题较难,使学生学习较为困难,目前国内尚缺少该课程的辅导教材和学习指导书,因此作者参考了1991年出版的《结构化学学习指导》,重新进行了编写,供高师及综合性大学的化学专业或应用化学专业读者使用,也为专升本、函授、自学物质结构的读者提供了方便。

全书分为八章:量子力学基础知识;原子的结构与性质;双原子分子的结构与性质;分子的对称性;多原子分子的结构与性质;配位化合物的结构与性质;测定分子结构的实验方法;晶体的结构与性质。

每章先作“分析与指导”,使读者在学习各章内容之初就有一个该章内容的轮廓和学习思路,了解各节内容的内在联系及重点,起到学习指导的“领路”作用。每节有基本内容、小结、题型及其解、自测题四部分。在“基本内容”中对课程所要求的知识点进行深入浅出地扼要阐述。“小结”中归纳和综合了每一节的概念、知识点及基本关系式,使读者对内容一目了然。为了方便读者,有的章节还列出了必要的数学公式。“题型及其解”是本书的重要内容之一,根据知识点,系统而全面地编写题目类型,并进行解题(指出思路和方法),使读者能够举一反三、触类旁通,对于深入理解和应用结构知识起了重要作用。“自测题”供读者思考与测试。

本书注重介绍物质结构学科的新进展和新成就,同时还注意联系生产、生活

实际与中学化学的教学实际,提高学生解决实际问题的能力,以适应培养 21 世纪化学人才的需要。为了方便读者,每章列出了主要参考资料,四个附录为读者提供了常用物理常数、物理量和公式的 SI 与 CGS 制的对照与换算以及原子半径数据等。

由于编者水平有限,本书错误和疏漏在所难免,恳请有关专家和广大读者批评指正。

作 者

1998 年 5 月

目 录

第二版前言

第一版前言

绪论	(1)
0.1 物质结构研究的主要内容	(1)
0.2 物质结构的学科价值	(3)
0.3 学习物质结构的一些建议	(4)
第1章 量子力学基础	(7)
1.1 微观粒子运动的特性	(8)
1.1.1 重要内容一览	(8)
1.1.2 内容提要	(9)
1.1.3 典型例题	(12)
1.2 量子力学的基本假定	(15)
1.2.1 重要内容一览	(15)
1.2.2 内容提要	(15)
1.2.3 典型例题	(20)
1.3 量子力学的简单运用	(22)
1.3.1 重要内容一览	(22)
1.3.2 内容提要	(23)
1.3.3 典型例题	(28)
1.4 自测题及答案	(36)
参考文献	(38)
第2章 原子的结构与性质	(39)
2.1 单电子原子的结构	(40)
2.1.1 重要内容一览	(40)
2.1.2 内容提要	(41)
2.1.3 典型例题	(49)
2.2 量子数与波函数	(58)
2.2.1 重要内容一览	(58)
2.2.2 内容提要	(59)
2.2.3 典型例题	(68)

2.3 多电子原子的结构	(71)
2.3.1 重要内容一览	(71)
2.3.2 内容提要	(72)
2.3.3 典型例题	(80)
2.4 原子光谱	(82)
2.4.1 重要内容一览	(82)
2.4.2 内容提要	(82)
2.4.3 典型例题	(90)
2.5 元素周期表及元素的周期性质	(94)
2.5.1 重要内容一览	(94)
2.5.2 内容提要	(94)
2.5.3 典型例题	(101)
2.6 自测题及答案	(104)
参考文献	(110)
第3章 双原子分子的结构与性质	(111)
3.1 氢分子离子的结构	(112)
3.1.1 重要内容一览	(112)
3.1.2 内容提要	(112)
3.1.3 典型例题	(118)
3.2 分子轨道理论和双原子分子结构	(120)
3.2.1 重要内容一览	(120)
3.2.2 内容提要	(120)
3.2.3 典型例题	(128)
3.3 分子轨道法与价键法初步比较	(130)
3.3.1 内容提要	(130)
3.3.2 典型例题	(131)
3.4 自测题及答案	(132)
参考文献	(134)
第4章 分子的对称性和点群	(135)
4.1 分子的对称性	(135)
4.1.1 重要内容一览	(135)
4.1.2 内容提要	(136)
4.1.3 典型例题	(138)
4.2 点群	(138)
4.2.1 重要内容一览	(138)

4.2.2 内容提要	(139)
4.2.3 典型例题	(143)
4.3 自测题及答案	(147)
参考文献	(149)
第5章 多原子分子的结构与性质	(150)
5.1 饱和分子的结构	(151)
5.1.1 重要内容一览	(151)
5.1.2 内容提要	(151)
5.1.3 典型例题	(156)
5.2 共轭分子的结构与 HMO 法	(160)
5.2.1 重要内容一览	(160)
5.2.2 内容提要	(160)
5.2.3 典型例题	(174)
5.3 缺电子分子的结构	(185)
5.3.1 重要内容一览	(185)
5.3.2 内容提要	(185)
5.4 自测题及答案	(187)
参考文献	(190)
第6章 配位化合物的结构与性质	(191)
6.1 价键理论	(192)
6.1.1 重要内容一览	(192)
6.1.2 内容提要	(192)
6.1.3 典型例题	(194)
6.2 晶体场理论	(194)
6.2.1 重要内容一览	(194)
6.2.2 内容提要	(194)
6.2.3 典型例题	(197)
6.3 分子轨道理论	(205)
6.3.1 重要内容一览	(205)
6.3.2 内容提要	(206)
6.3.3 典型例题	(209)
6.4 自测题及答案	(216)
参考文献	(218)
第7章 测定分子结构的实验方法	(220)
7.1 双原子分子光谱	(221)

7.1.1 重要内容一览	(221)
7.1.2 内容提要	(223)
7.1.3 典型例题	(227)
7.2 多原子分子光谱	(232)
7.2.1 重要内容一览	(232)
7.2.2 内容提要	(232)
7.2.3 典型例题	(235)
7.3 核磁共振	(238)
7.3.1 重要内容一览	(238)
7.3.2 内容提要	(238)
7.3.3 典型例题	(242)
7.4 光电子能谱简介	(247)
7.4.1 重要内容一览	(247)
7.4.2 内容提要	(247)
7.4.3 典型例题	(248)
7.5 自测题及答案	(250)
参考文献	(253)
第8章 晶体结构与性质	(254)
8.1 晶体的点阵理论	(255)
8.1.1 重要内容一览	(255)
8.1.2 内容提要	(256)
8.1.3 典型例题	(260)
8.2 X射线衍射法	(265)
8.2.1 重要内容一览	(265)
8.2.2 内容提要	(266)
8.2.3 典型例题	(270)
8.3 结晶化学	(277)
8.3.1 重要内容一览	(277)
8.3.2 内容提要	(278)
8.3.3 典型例题	(295)
8.4 自测题及答案	(313)
参考文献	(318)
附录	(320)
I 表示单位倍数和分数的冠词	(320)
II 常用的数学公式	(321)

III	常用的物理常数和一些物理量在两种单位制中的对照及换算·····	(322)
IV	两种不同单位制中一些公式的对照表·····	(323)
V	范德华半径、共价半径和金属原子半径(单位:pm) ·····	(324)

绪 论

人们生活在多姿多彩的物质世界里。整个自然界包括人类自身,都是由物质构成的。对于物质的认识范围,人们已从普通物质扩大到暗物质、暗能量;对于宏观世界,从长期以来一直局限于地球上的物体和太阳系,扩展到星系和宇宙,达到 10^{26}m (10^{10} 光年)以上大尺度范围;对于微观世界,从原子、分子层次深入到夸克、轻子等层次,即深入到 10^{-19}m 的极小空间。

普通物质分成两类:一类是静止质量不为零的实物;一类是静止质量为零的场,如光、电、磁等。化学是物质科学的重要组成部分,是在原子、分子的层次上研究实物的组成、结构、性质和反应规律的科学。

物质结构、生命起源和宇宙起源等一些有关自然界本源的问题,自古以来就不断有哲人、学者在思考与探究。20世纪科学的飞速发展使人类正在走近这些问题的核心。在化学学科中,物质结构(结构化学)是物理化学的重要分支学科,物质结构也就理所当然地成为大学本科的基础课程。

0.1 物质结构研究的主要内容

物质结构是个大概念。物质(实物)的每一个层次都有其内在的结构,层次间又相互关联。恩格斯说过“在19世纪对于化学家是原子的世纪”,20世纪化学研究的重心移到分子,成为分子科学,并向分子以上的层次拓展。作为分子科学,化学重点研究分子的电子结构和几何结构。分子的电子结构是指分子中原子核和核外电子的运动和相互作用,以及分子如何由原子构成(化学键的本质)。分子的几何结构是指分子中原子的排列顺序、彼此之间的距离与方位,常用键长、键角、二面角等结构参数表示。分子对称性是分子几何结构的本质特征。分子的这两种结构密切相关,分子的几何结构特别是其对称性如何,关系到分子的电子运动状态,而由分子的电子结构则可决定何种几何结构最为稳定。

物质的分子结构有静态结构和动态结构之分。当物质处于稳定状态时,物质的分子结构不随时间而变化,称为静态结构。如果物质处于化学变化的过程之中,反应物从某一种静态结构转变为生成物的另一种静态结构,在其过程中产生的激发态、过渡态、中间产物等的结构称为动态结构。显然,研究动态结构以静态结构的研究为基础。

值得注意的是,人们对于结构的认识正朝着分子以上的层次突破。分子以上

的层次指:多个分子构成的分子组装体或分子聚集体;具有高级有序结构;在分子聚集体中分子间通过弱相互作用结合。其中,既有凝聚态,又有分散态;有硬材料,也有软物质;有合成的,也有天然的。一个实例就是贝壳与蛋壳。贝壳很硬,而蛋壳很容易敲破。贝壳和蛋壳基本组成相同,都由碳酸钙和有机基质构成,但有不同的组装方式和不同的外形,即有不同的分子以上层次的结构,因而表现不同的性能。

基于分子是由原子构成的,因此分子结构的研究必然会向着更小的层次——原子深入。原子是物质科学中最基本、最重要的概念之一。从认为原子不可分,不同的原子仅是大小、形状和运动等量的差别,到原子由原子核与核外电子构成,原子的性质取决于原子核中的质子数与核外电子的运动状态;从研究最简单的氢原子,建立氢原子模型,到精确计算氢原子中的电子能级,进而推广到复杂的多电子原子;从猜想中的原子到1982年IBM公司苏黎世实验室的两位科学家宾尼希(G. Binnig)和罗勒(H. Rohrer)根据量子隧道效应发明了扫描隧道显微镜,真实地“看到”与搬动原子。人们对于原子的认识经历了古代原子学说、道尔顿的原子论、原子-分子论的确立和发展等阶段。原子不仅是一个抽象的模型,还是一个实实在在的客体。

人们日常接触到的物质,无论是单质还是化合物,都以大量原子或分子的聚集状态存在。物质除常见的气态、液态和固态三种聚集状态外,还有第四态(等离子态)、第五态(玻色-爱因斯坦凝聚态)和第六态(费米凝聚态)。状态的多样性还表现为固态有晶态和非晶态之分;在晶态和液态之间存在着像晶态的液体——液晶和像液态的晶体——塑晶;在气态和液态之间存在着超临界流体等。每一种聚集状态都有其不同的结构特征。对晶态物质来说,表面相结构与体相结构是有差别的。吸附、催化、腐蚀等都在表面相进行,因此研究表面相的结构非常重要。

20世纪物质结构的研究获得长足的进步。对单质和化合物的研究从碳元素向非碳元素,主要是金属元素,特别是d区元素及其化合物的研究转移;从中小分子的结构研究向生物大分子强烈倾斜,并沿着高精度、高效率和高难度方向发展;从体相结构向结构缺陷和表面结构深入;从研究静态结构、稳态结构向动态结构、瞬态结构研究推进。

原子和分子都是微观粒子,具有波粒二象性,其运动遵循量子力学的规律。因此,学习原子结构和分子结构,进而揭示结构与性质的关系,首先必须学习量子力学基础。1927年,海特勒(H. Heitler)和伦敦(F. London)将量子力学理论用于化学键的研究,成功地解释了氢分子的成因,奠定了量子化学的基础。量子化学的诞生促使化学沿着定性分析和定量分析综合的途径,从经验性和半经验性逐渐向定量化、微观化和推理化阶段过渡。

化学虽然侧重于研究实物,但要认识其性质与结构,除了研究它们之间的相互作用(主要是化学作用)外,还要研究实物与场相互作用时表现的各种效应。物理

学家研究开发的各种谱学技术,为化学家研究物质结构提供了有力的手段,使物质结构的研究从早期用化学方法推测结构,到用物理方法直接测定结构。物理方法按测试要求可分为体相分析和表面相分析;按测试原理可分为光谱法(紫外可见光谱、红外光谱)、磁共振法(电子自旋共振法、核磁共振法和穆斯堡尔谱)、能谱法(X光电子能谱、紫外光电子能谱)和衍射法(X射线衍射、电子衍射、中子衍射)等。其中红外光谱与核磁共振已成为测定分子结构最常用的手段,但是它们只能测得分子局部的结构信息。X射线衍射可以确定晶体和分子的整体结构,但是只能测定体相结构,而能谱法则可测定表面相结构。可见,采用多种方法进行综合分析,才能获得完整的结构信息。物质结构的表征方法也是我们学习的重要内容之一。

《物质结构学习指导》和通常的《物质结构》教材都仅仅讨论有关原子结构、分子结构和晶体结构的基础理论(原子结构理论、化学键理论和点阵理论)和典型的结构表征方法,以打好量子力学基础、对称性理论基础、晶体学基础与结构表征方法的基础,形成结构决定性质的化学学科意识。应该提醒同学们的是物质结构的理论与实验是极其丰富的,决不仅仅教科书上讨论的一些内容,希望同学们关注物质结构理论与实验的发展,并且注意物质结构的层次性、层次之间的相互关联性以及结构的复杂性与隐蔽性。

0.2 物质结构的学科价值

(1) 结构决定性质,是物质科学中最基本的规律。

研究物质的性质、结构以及结构决定性质的规律,是物质科学中最基本、最重要的内容之一。人们认识物质,可能始于对物质性质的了解和对物质用途的发现。随着人们对于物质性质的深入了解,必然思考为什么不同的物质具有不同的性质。因此,随着物质科学的深入研究,必然会探究物质的组成与结构以及结构决定性质的规律。

每一种物质的分子都有其独特的电子结构与几何结构。无机物分子如此,具有重要生物学意义的有机化合物分子与生物大分子更是如此。分子的电子结构与分子的形状或分子中某个特定部位的形状,与物质的性质密切相关。例如碘化银晶体,常温下共价键占优势,高温下离子键占优势,因而高温时的电导率比常温时大了约一万倍。又如,两种不同手性的分子可能具有明显不同的生物活性。DNA、酶、抗体、激素与很多药物分子都是手性分子。药物分子必须与受体(起生化反应的物质)分子的结构相匹配才能起到应有的药效。于是两种异构体中往往仅有一种是有效的,另一种是无效甚至有害的。

总之,研究物质的性质、结构以及结构决定性质的规律是物质结构科学永恒的研究课题,也是人们需要形成的最基本的化学学科意识。

(2) 研究物质的组成与结构,为化学合成技术提供坚实的基础。

正如徐光宪院士所说的,20 世纪发明了六大技术:信息技术,生物技术,核科学和核武器技术,航空航天和导弹技术,激光技术,纳米技术。但却很少有人提到包括新药物、新材料、高分子、化肥和农药的化学合成(包括分离)技术。上述六大技术如果缺少一两个,人类照样生存。但如没有发明合成氨、合成尿素和第一、第二、第三代新农药的技术,世界粮食产量至少要减半,60 亿人口中的 30 亿就会饿死。没有发明合成各种抗生素和大量新药物的技术,人类平均寿命要缩短 25 年。没有发明合成纤维、合成橡胶、合成塑料的技术,人类生活要受到很大影响。没有合成大量新分子和新材料的化学工业技术,上述六大技术根本无法实现。总之,合成物质不仅是化学学科有别于其他学科的最大特色之一,也是化学家改造世界、保护世界的有力手段。

根据物质结构与性质的关系,化学家不但能够制备大量具有天然物质性能的物质,而且能够根据需要对天然物质的分子进行修饰和改造,甚至合成自然界中本不存在的物质,如合成材料、复合材料、智能材料等。

例如,一种从海洋生物中分离出来的天然产物海葵毒素,是非蛋白质毒素中最毒的物质。海葵毒素的生物活性很高,具有多种药理效应,是最强的冠脉收缩剂,具有强的抗癌活性,因而引起科学家的重视。海葵毒素的相对分子质量为 2677,分子式为 $C_{129}H_{223}N_3O_{54}$,有 64 个手性碳,7 个双键,可能的光学异构体多达 $2^{71} \approx 2 \times 10^{21}$ 个。要合成这样一个复杂的、立体专一的分子,是何等的困难!1989 年,哈佛大学的 Kishi 教授经过 8 年的努力,由 24 位研究生和博士后完成了海葵毒素的全合成,标志着有机合成达到了一个空前的高度,因而被誉为有机合成攀登珠穆朗玛峰的壮举。不言而喻,合成的基础是确定它的结构。海葵毒素是一种复杂的聚醚化合物,对其分子结构的测试花了 10 年时间于 1981 年底才完成。

又如,抗疟疾药蒿甲醚是中国第一个被国际公认的独创新药。它是对青蒿素结构进行修饰改造而得。蒿甲醚克服了青蒿素复发率高、溶解性差、疗效尚不够理想等缺点,其抗疟疾活性比青蒿素提高了 6 倍,解决了由于疟原虫对奎宁类抗疟疾药的严重抗药性而导致的全球性疟疾传播问题。20 世纪 90 年代,蒿甲醚被世界卫生组织列为治疗凶险型疟疾的首选药品,1997 年列入世界药典。

总之,“合成化学家心里想的是分子,实际是它的结构”。合成离不开物质结构的研究。

0.3 学习物质结构的一些建议

学习方法因人而异,建议学习物质结构课程时注意:

1. 关注物质结构的学科特点

1) 演绎与归纳

量子力学是建立在几个基本假定上的演绎体系。正确理解量子力学体系的前提是理解这些基本假定的必要性、合理性以及相互之间的关联性。例如,为什么微观体系的状态要用波函数表示?波函数如何表示微观体系的状态?为什么微观体系的力学量要用线性厄米算符表示?线性厄米算符如何表示微观体系的力学量等诸多问题。化学系的学生对于量子力学演绎体系不熟悉,一开始学习物质结构可能不习惯。随着原子结构与分子结构内容的学习,会慢慢适应并逐渐加深对于量子力学原理的理解。

归纳法也是研究物质结构常用的方法。物质结构的研究经历了从用化学方法推测结构,到用物理方法直接测定结构的过程。基于每一种测试方法都只提供某些特定的结构信息,都有一定的适用范围,因而需要在多种方法测试的基础上对结构信息进行归纳与综合。

剖析测试结果需要量子力学原理指导,量子力学原理需要测试结果的有力支撑。总之,研究物质结构,演绎法和归纳法相辅相成。

2) 模型与原型

从最简单的体系入手,然后将结果推广到复杂体系,是研究物质结构的常用方法。在推广过程中必然引进近似或建立某些模型。因此,必须注意结论的适用范围。例如研究原子结构,首先研究氢原子结构,精确求解氢原子的薛定谔方程,然后将结果推广到多电子原子结构,其间引进了单电子近似。模型是对原型的简化,为的是突出影响原型的某些主要因素的作用。由于忽略了其他因素的影响,因而必然引进近似。为使模型逼近原型,需要修正模型。例如研究双原子分子的振动光谱,常把双原子分子的振动看作一个谐振子的振动,然后对谐振子模型做非谐振子校正。

3) 数学方法与物理意义

一门学科运用数学的程度往往可以表示这门学科的成熟程度。物质结构这门学科是化学学科中运用数学较多的学科之一。

物质结构中每一个数学表达式都有丰富、特定的物理意义。例如,定态波函数的坐标和时间可以变量分离,表示定态波函数具有驻波的特征。又如,定态薛定谔方程是一个二阶线性的偏微分方程,求解的结果既能得到体现微观体系粒子性的能量 E ,又能得到体现微观体系波动性的波函数 ψ 。体系不同,势能函数不同,薛定谔方程的具体形式不同,能量和波函数也就不同。

注意:数学方法是工具、是手段,千万不能陷入一步一步求解过程之中,忘了最终目的是分析所得结果的丰富涵义。在数学处理过程中有时会引进某些近似,因

此所得的结论是有限制条件的。还应注意,不能认为反正是近似处理,便将结果随意推广。

2. 重视物质结构理论发展的进步性

具有真理性的科学知识可能包含着错误。科学家从事科学探究的任务在于不断地揭示现有科学理论中错误的内容,代之以新的、真的内容。于是在科学史上就形成一个先后次序的理论系列,其中每一阶段出现的理论都是对客观世界真理性的近似描述,而且后面的理论比前面的理论更接近真理。

不断地关注、思考物质结构概念的演变与发展,这对于一个未来的中学化学教师尤为重要。例如对于氧化的认识,最初认为氧化就是与氧气反应,后来认识到脱氢也是氧化,再其后认识到氧化还原反应的本质就是失得电子,氧化就是能量最高被占轨道上失去电子,还原就是在能量最低的空轨道上得到电子。又如对于共价键的认识,从成键就是两个自旋相反的电子配对,到电子配对只是受泡利原理的限制;从共价键只有双电子键一种形式,到除了双电子键还有单电子键、叁电子键等多种成键形式;从定域键到离域键;从认识成键轨道在成键过程起成键作用,到认识反键轨道在成键过程也起着重要的作用……总之,认识总是逐渐深化的,后面的认识总是包含与修正前面的认识。因此,不仅要学习最新的知识,而且要清除那些已经过时的认识,适时地更新自己的知识结构。

科学知识是对真实世界的阐释,而不是真实世界的影照。对于科学概念、理论的理解不能僵死、固化。例如,离子键、共价键和金属键都是典型的化学键。三种化学键的本质都是电磁相互作用,彼此间有着内在的联系:共价键是原子间共用电子对,如果这对电子偏向某个原子,则为极性共价键;如果这对电子仅由一个原子提供,则为配位键;如果这对电子完全属于某个原子,则为离子键。金属键既可看成很多金属原子共用自由电子,又可看作金属正离子与自由电子的静电作用。实际上,纯粹属于这三种键型之一的化学键只是少数,多数偏离这三种极端的键型,且常以一种为主,并多少包含一些其他的键型。例如,氯化氢分子是典型的共价键分子,但也含有离子键的成分。原子之间只要满足成键条件,就会以多种方式最大限度地形成多种形式的化学键。金刚石、石墨与 C_{60} 中碳原子成键的多样性就是典型的实例。

知识不等于智慧。重要的是清楚物质结构学科的发展和理论的来龙去脉,了解专业知识的产生过程、知识之间的相互联系以及整个知识体系的框架,从中理解物质结构知识的思维形式和思维方法,形成最基本的物质结构的学科意识,使所学的化学知识转变为化学智慧。