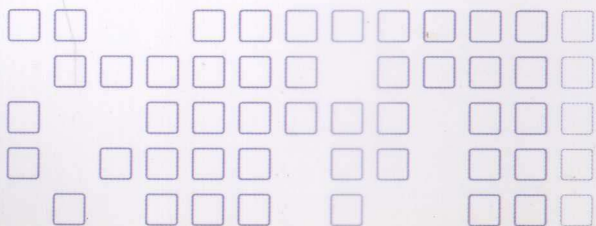


胡小玲 苏克和 主编

物理化学简明教程



 科学出版社



物理化学简明教程

胡小玲 苏克和 主编

科学出版社

北京



内 容 简 介

本书是根据教育部高等学校化学与化工学科教学指导委员会制定的近化学类专业化学基础课教学基本要求编写的。它突出了物理化学教学的基本特点与发展方向,在教学内容更新方面有较大的力度,引入一些已成熟的现代方法(如量子化学、统计热力学、非平衡热力学等方法),并以简明扼要的方式涵盖物质结构研究方法的前沿与进展,形成了本书鲜明的特色。本书理论体系完整,脉络清晰,层次分明,推理与叙述严谨,注重科学素养、创新思想方法和理论联系实际等基本素质的培养。

全书共 11 章,包括绪论、热力学第一定律和热化学(包括热化学的量子化学计算)、热力学第二定律(包括统计热力学简介)、多组分系统热力学、相平衡、化学平衡(包括非平衡热力学简介)、电解质溶液、电化学、界面现象、化学动力学和物质结构研究方法(包括量子化学方法、分子力学与分子动力学方法、物质结构的现代光谱分析)。

本书可作为高等学校化学、化工、材料、能源、环境、食品等各专业的教材,也可供相关科研和工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

物理化学简明教程/胡小玲,苏克和主编. —北京:科学出版社,2012.6
ISBN 978-7-03-034902-6

I. ①物… II. ①胡… ②苏… III. ①物理化学-高等学校-教材
IV. ①O64

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 130120 号

责任编辑:赵晓霞 / 责任校对:钟 洋
责任印制:闫 磊 / 封面设计:迷底书装

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>

保定市中国画美凯印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2012 年 6 月第 一 版 开本:787×1092 1/16

2012 年 6 月第一次印刷 印张:24 3/4

字数:630 000

定价:54.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

本书根据 2010 年教育部高等学校化学与化工学科教学指导委员会制定的近化学类专业化学基础课教学基本要求,结合编者多年的教学经验和参加教育部教学改革的研究成果编写而成。本书的编写参考了国内外物理化学教学的发展趋势和在教学改革中的经验总结,确保基本要求、突出基本概念和基础理论的同时,在教学内容更新、素质培养、创新能力和理论联系实际等方面形成了较为鲜明的特色,内容基本上与国际接轨。由于物理化学是一门理论性强的基础理论课程,并且是联系其他课程的理论纽带,对后续专业课程的学习及基本科学素养的形成与提高都有着深远的影响,因此本书在编写过程中,特别注重提出问题与解决问题的基本思想方法的剖析。

在化学、化工、环境和材料科学等领域,对基本热化学数据的需求、统计热力学和非平衡热力学方法的广泛应用等,形成了当前学科发展的特色。因此本书在有关章节中增加了一些相关内容,予以简介。

受历史因素的影响,传统教材大多保留了非标准化学平衡常数的讲述,本书根据发展趋势,在这一部分做了较大幅度的变动,主要围绕标准平衡常数展开讨论。

物质结构是物理化学学科的有机组成,但工科院校一般难以另行开课予以介绍,致使研究生培养过程中普遍存在知识结构欠缺的问题。因此本书结合这方面的发展动态,用一章的篇幅予以简介。

全书每章均配有本章框架和基本要求,突出了众多内容的逻辑关系,对于学生理解和掌握物理化学基础理论具有重要作用。

全书物理量的符号和单位一律采用国家标准。附录数据尽可能采用了国际公认最新数值。

本书由胡小玲、苏克和主编。胡小玲编写了第 2 章、第 3 章、第 7 章、第 8 章、第 9 章,苏克和编写了第 1 章、第 4 章、第 5 章、第 6 章、第 10 章、第 11 章。

限于编者水平和经验,书中疏漏与不当之处在所难免,恳请读者批评指正。

编 者

2012 年 3 月

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 物理化学的研究对象	1
1.1.1 过程的能量、方向和限度	1
1.1.2 过程进行的速率和机理	1
1.1.3 物质结构和性质	1
1.2 物理化学的研究方法	2
1.2.1 热力学方法	2
1.2.2 动力学方法	2
1.2.3 量子力学方法	2
1.3 物理化学的作用和学习方法	3
1.3.1 注重思想方法	3
1.3.2 注重数理逻辑	3
1.3.3 注重公式、结论和定律的适用条件	3
1.3.4 注重习题的分析与解答	3
1.3.5 注重思考和总结	4
第 2 章 热力学第一定律和热化学	5
2.1 热力学基本概念	5
2.1.1 系统和环境	5
2.1.2 状态和状态函数	6
2.1.3 容量性质和强度性质	7
2.1.4 过程和途径	7
2.1.5 热力学平衡态	9
2.2 热力学第一定律	9
2.2.1 热力学第一定律的数学表达式	9
2.2.2 热力学能	10
2.2.3 热和功	11
2.3 体积功	12
2.3.1 体积功	12
2.3.2 体积功的计算	12
2.3.3 最大体积功	13
2.4 热力学可逆过程	15
2.4.1 热力学可逆过程	15
2.4.2 可逆过程与最大功	16

2.4.3 可逆相变体积功	16
2.5 热力学第一定律的两个重要推论	17
2.5.1 两个重要的推论	18
2.5.2 焓	18
2.6 标准热容	19
2.6.1 热力学标准状态	19
2.6.2 标准热容	19
2.6.3 热容与温度的关系	21
2.6.4 理想气体的热容	22
2.7 气体状态变化过程的热力学	23
2.7.1 理想气体的热力学能与焓	23
2.7.2 绝热过程	24
2.7.3 实际气体的节流膨胀	27
2.8 相变热与相变焓	30
2.8.1 标准相变焓	30
2.8.2 相变化过程的 ΔU	30
2.8.3 相变焓随温度的变化	31
2.9 化学反应热效应	32
2.9.1 化学反应热效应	32
2.9.2 热力学标准状态	33
2.9.3 反应进度	34
2.9.4 摩尔反应焓	34
2.9.5 标准摩尔反应焓	34
2.9.6 赫斯定律	35
2.9.7 化学反应焓变的计算	35
2.10 焓变与温度的关系——基尔霍夫方程	37
2.11* 热性质数据的来源	40
2.11.1 实验测定	40
2.11.2 经验半经验方法	40
2.11.3 理论方法	41
2.12* 热力学函数的量子化学理论计算	42
思考题	43
习题	45
第3章 热力学第二定律	50
3.1 自发过程的共同特征	50
3.2 热力学第二定律的经典表述	51
3.3 卡诺定理与热力学第二定律的建立	52
3.3.1 卡诺循环	52
3.3.2 卡诺定理	54

3.4 熵函数与可逆性判据	55
3.4.1 可逆过程的热温商与熵函数	56
3.4.2 不可逆过程的热温商与熵函数	57
3.4.3 克劳修斯不等式与熵增大原理	58
3.5 熵变的计算	59
3.5.1 恒温过程的熵变	60
3.5.2 恒压或恒容变温过程的熵变	61
3.5.3 气体混合过程的熵变	62
3.5.4 绝热过程的熵变	64
3.5.5 相变过程的熵变	65
3.6 熵的物理意义	70
3.6.1 自发过程的微观本质	70
3.6.2 熵与微观状态数的关系	71
3.7 热力学第三定律及化学反应的熵变	72
3.7.1 热力学第三定律	72
3.7.2 标准摩尔熵	73
3.7.3 化学反应熵变的计算	74
3.8 吉布斯函数和亥姆霍兹函数	75
3.8.1 恒温恒容系统——亥姆霍兹函数	75
3.8.2 恒温恒压系统——吉布斯函数	76
3.9 ΔG 的计算	77
3.9.1 恒温可逆过程的 ΔG	77
3.9.2 相变过程的 ΔG	78
3.9.3 化学反应的 ΔG	81
3.9.4 ΔG 随温度 T 的变化——吉布斯-亥姆霍兹公式	82
3.10 封闭系统的热力学基本方程	83
3.10.1 热力学基本方程	83
3.10.2 U, H, A, G 的一阶偏导数和吉布斯-亥姆霍兹方程	84
3.10.3 麦克斯韦关系式	85
3.10.4 U, H, S 对 T 的偏导数	85
3.10.5 其他重要的偏微分方程	85
3.11* 统计热力学简介	87
3.11.1 统计热力学的基本思想	87
3.11.2 统计热力学的主要结论	90
思考题	95
习题	96
第4章 多组分系统热力学	101
4.1 偏摩尔量	101
4.1.1 偏摩尔量的定义	102

4.1.2	偏摩尔量的重要公式	103
4.1.3	偏摩尔量的求算	106
4.2	化学势与热力学平衡	106
4.2.1	化学势的定义	106
4.2.2	化学势判据	107
4.2.3	气体、纯液体、纯固体的化学势	108
4.3	稀溶液中的两个经验定律	110
4.3.1	溶液浓度的表示法	110
4.3.2	拉乌尔定律	112
4.3.3	亨利定律	112
4.3.4	两定律的联系与区别	113
4.4	理想溶液	114
4.4.1	理想溶液的定义	114
4.4.2	理想溶液蒸气压与组成的关系	114
4.4.3	理想溶液中组分的化学势	116
4.4.4	理想溶液形成过程的热力学函数变化	117
4.5	理想稀溶液	119
4.5.1	理想稀溶液中组分的化学势	119
4.5.2	理想稀溶液的依数性	120
4.6	实际溶液和活度	126
4.6.1	实际溶液的蒸气压	126
4.6.2	活度与实际溶液的化学势	127
	思考题	128
	习题	129
第5章	相平衡	132
5.1	几个基本概念	132
5.1.1	相和相数	132
5.1.2	物种数和独立组分数	133
5.1.3	自由度	135
5.2	相律及其计算	135
5.2.1	相律的推导	135
5.2.2	相律的应用	137
5.3	单组分系统的相平衡	138
5.3.1	克拉贝龙方程	138
5.3.2	克拉贝龙-克劳修斯方程	140
5.3.3	单组分系统相图举例	141
5.4	二组分系统液-气平衡相图	143
5.4.1	完全不互溶双液系统	143
5.4.2	完全互溶双液系统	144

5.5 简单低共熔混合物二组分系统液-固平衡相图	146
5.5.1 形成简单低共熔混合物的二元合金系统相图	147
5.5.2 形成简单低共熔混合物的二元水盐系统相图	151
5.6 形成化合物的二组分系统液-固平衡相图	153
5.6.1 形成稳定化合物系统的相图	153
5.6.2 形成不稳定化合物系统的相图	154
5.7 完全互溶固溶体的二组分系统液-固平衡相图	155
5.8 部分互溶固溶体的二组分系统液-固平衡相图	157
5.8.1 低共熔型部分互溶固溶体的相图	157
5.8.2 转熔型部分互溶固溶体的相图	158
5.9 部分互溶的二组分系统液-液溶解平衡相图	159
5.10 三组分系统相图简介	161
5.10.1 等边三角形坐标图示法	161
5.10.2 二盐一水系统相图	162
5.10.3 部分互溶的三组分系统液-液溶解平衡相图	164
思考题	165
习题	167
第6章 化学平衡	170
6.1 化学平衡的热力学条件	170
6.2 化学反应的标准平衡常数	171
6.2.1 化学反应的标准平衡常数	171
6.2.2 分解反应的标准平衡常数与分解压	172
6.3 化学反应等温方程	174
6.3.1 化学反应等温方程	174
6.3.2 化学反应等温方程的应用	175
6.4 标准平衡常数的求算与测定	176
6.4.1 K^\ominus 的理论计算	176
6.4.2 K^\ominus 的实验测定	179
6.5 温度对标准平衡常数的影响	180
6.5.1 范特霍夫等压方程	180
6.5.2 等压方程的应用	181
6.6 其他因素对化学平衡的影响	184
6.6.1 分压(或浓度)的影响	185
6.6.2 总压的影响	185
6.6.3 惰性气体的影响	185
6.6.4 平衡移动原理	186
6.7 平衡混合物组成的计算示例	186
6.8 非平衡热力学简介	189
6.8.1 非平衡热力学的发展	189

6.8.2 熵流和熵产生	190
6.8.3 近平衡区	193
6.8.4 远离平衡区与自组织现象	195
思考题	196
习题	197
第7章 电解质溶液	200
7.1 电解质溶液的平衡性质	200
7.1.1 电解质和离子的化学势	200
7.1.2 电解质溶液的活度和活度系数	201
7.1.3 离子平均活度和平均活度系数	201
7.1.4 离子强度	202
7.1.5 电解质溶液活度的理论——离子互吸理论	205
7.2 电解质溶液的传递性质	206
7.2.1 电导及电导率	206
7.2.2 摩尔电导率	207
7.2.3 电导率及摩尔电导率与电解质浓度的关系	208
7.2.4 离子独立运动定律	209
7.2.5 电导测定的一些应用	210
7.3 离子电迁移率和迁移数	213
7.3.1 离子电迁移率	213
7.3.2 离子迁移数	214
7.3.3 迁移数与电迁移率的关系	215
思考题	215
习题	216
第8章 电化学	217
8.1 电化学系统概述	217
8.2 电化学系统中的界面电势差	218
8.2.1 电化学系统中的界面电势差	218
8.2.2 电动势的产生	220
8.3 可逆电池和可逆电极	220
8.3.1 可逆电池和不可逆电池	221
8.3.2 电极的类型	223
8.3.3 可逆电池的设计与表示方法	224
8.3.4 电动势的测定	225
8.3.5 可逆电池电动势的取号	226
8.4 可逆电池热力学	227
8.4.1 可逆电池电动势与浓度的关系	227
8.4.2 电动势 E 及其温度系数 $\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_p$ 与电池反应热力学量的关系	229

8.4.3 离子的热力学量	230
8.5 电极电势和电池电动势	232
8.5.1 标准氢电极	232
8.5.2 标准电极电势	232
8.5.3 电池电动势的计算	237
8.6 电动势测定的应用	242
8.6.1 判断化学反应趋势	242
8.6.2 计算化学反应的平衡常数	243
8.6.3 计算微溶盐活度积	243
8.6.4 计算离子平均活度系数	244
8.6.5 pH 的测定	245
8.6.6 电势滴定	246
8.7 电极的极化和过电势	246
8.7.1 不可逆条件下的电极电势	246
8.7.2 电极极化的原因	247
8.7.3 过电势的测量	249
8.8 电解时的电极反应	250
8.8.1 阴极反应	251
8.8.2 阳极反应	252
8.9 金属的电化学腐蚀与防腐	253
8.9.1 金属的电化学腐蚀	253
8.9.2 金属的防腐	256
8.10* 化学传感器和化学电源	258
8.10.1 化学传感器简介	258
8.10.2 化学电源	260
8.11* 生物电化学	262
8.11.1 细胞膜与膜电势	262
8.11.2 电化学在生物体中的应用	263
思考题	263
习题	264
第9章 界面现象	269
9.1 表面张力与表面能	269
9.1.1 表面张力	269
9.1.2 表面能	270
9.1.3 表面张力与温度的关系	271
9.2 界面热力学	271
9.2.1 存在相界面的热力学基本方程	271
9.2.2 有界面相时的平衡判据与平衡条件	272
9.3 弯曲表面下的压力及附加压力	272

9.4 弯曲液面的蒸气压	275
9.4.1 凸面液体(或液滴)饱和蒸气压随曲率半径的变化	275
9.4.2 凹面液体的饱和蒸气压随曲率半径的变化	276
9.4.3 过饱和状态	276
9.5 液体界面的性质	278
9.5.1 液体的铺展	278
9.5.2 溶液表面的吸附现象	278
9.5.3 吉布斯吸附公式	280
9.5.4 分子在两相界面上的定向排列	280
9.6 液体与固体的界面现象	282
9.6.1 液体在固体表面上的润湿作用	282
9.6.2 接触角与润湿	284
9.7 表面活性剂及其作用	285
9.7.1 表面活性剂的分类	285
9.7.2 表面活性剂的结构及其效率	286
9.7.3 胶束和临界胶束浓度	287
9.7.4 表面活性剂的几种重要作用	290
9.8 气体在固体表面上的吸附	293
9.8.1 固体的表面能	293
9.8.2 吸附的类型	294
9.8.3 吸附平衡与吸附量	294
9.8.4 吸附曲线	295
9.8.5 朗格缪尔单分子层吸附等温式	296
9.8.6 BET 多分子层吸附等温式	298
9.8.7 其他吸附等温式	299
思考题	299
习题	300
第10章 化学动力学	303
10.1 化学动力学的目的与任务	303
10.2 化学反应机理简介	303
10.2.1 碰撞理论的基本思想	304
10.2.2 分子的电子态与势能面	304
10.2.3 过渡状态理论的基本思想	305
10.3 反应速率的表示与测定	307
10.4 反应速率的经验公式	308
10.4.1 质量作用定律	308
10.4.2 速率常数——阿伦尼乌斯公式	309
10.5 简单级数反应的浓度-时间关系	309
10.5.1 一级反应	310

10.5.2	二级反应	310
10.5.3	三级及零级反应	312
10.5.4	反应级数的测定	314
10.6	复杂反应动力学	315
10.6.1	对峙反应	315
10.6.2	平行反应	316
10.6.3	连串反应	317
10.6.4	速率公式的近似处理方法	318
10.7	链反应	320
10.7.1	自由基与链反应	320
10.7.2	直链反应	321
10.7.3	支链反应	323
10.8	催化反应	325
10.8.1	催化反应的基本原理	325
10.8.2	催化剂的基本特性	326
10.8.3	催化剂的应用举例	327
10.9	反应速率理论简介	328
10.9.1	双分子碰撞理论	328
10.9.2	过渡状态理论简介	330
10.9.3	速率理论与经验公式的比较	332
	思考题	333
	习题	334
第 11 章	物质结构研究方法	337
11.1	量子化学方法	337
11.1.1	量子化学的发展	337
11.1.2	量子力学基本假定	339
11.1.3	分子的薛定谔方程与求解原则	340
11.1.4	波函数的构造与方程的求解	341
11.1.5	分子势能面、结构优化与振动分析	345
11.1.6	量子化学计算与应用	348
11.2	分子力学与分子动力学方法	350
11.2.1	分子力场	350
11.2.2	分子力学方法	352
11.2.3	分子动力学方法	352
11.2.4	分子模拟的应用	353
11.3	物质结构的现代分析测试方法简介	354
11.3.1	成分分析	354
11.3.2	结构分析	355
	思考题	357

习题	357
参考文献	359
附录	360
附录 1 国际单位制与基本物理常数	360
附录 2 物质的重点标准摩尔热化学数据(CODATA)	362
附录 3 一些单质与化合物的标准摩尔热化学数据	366
附录 4 一些物质在 298.15 K 时的标准摩尔燃烧焓	372
附录 5 元素的相对原子质量	373
名词索引	375

第 1 章 绪 论

1.1 物理化学的研究对象

凡涉及物质形态、成分、性质和分子结构发生变化的科学,都必须研究这些变化的基本规律。物质变化可以是物理变化(如相变、物理吸附等),也可以是化学变化。在变化过程中,必然伴随各种通过实验方法可进行测量的物理量,如热、功、声、光、电、磁等的改变。物理化学就是从研究化学现象和物理现象之间相互联系的角度,应用物理学的基本原理、实验方法和必要的数学手段,研究物质变化基本规律的科学。因此,物理化学还是一门在化学、材料、能源、环境、生物等众多学科中居于核心地位的基础理论科学。

物理化学研究的内容十分丰富,结合当前学科的发展,大致可归纳为三个方面。

1.1.1 过程的能量、方向和限度

一定条件下,一个化学反应可以给我们提供多少能量?一定条件下,一个过程(包括物理变化和化学变化)能否朝人们希望的方向进行?如果能进行,进行到什么程度为止?改变温度、浓度、压力等外界条件又会对过程的进行产生怎样的影响?这些就是物理化学首先要回答的问题。由于人们从各种宏观现象入手,以热力学理论为基础来研究这些与化学变化有关的问题,因此称之为化学热力学。

1.1.2 过程进行的速率和机理

速率是一个实际过程进行的现实性问题。从热力学的角度研究一个过程的能量、方向和限度是必要的,但不是充分的。例如,一个反应如果在给定条件下不能进行,则谈不上速率;可以进行也只是可能性。能否在一定时间内实现,热力学则不能回答。此外,在科学研究中,人们总是希望明确一个过程进行的具体细节,从微观角度探寻反应发生的机理。反应速率与反应机理的研究形成了化学动力学。因此,化学动力学包括宏观动力学与微观动力学,一方面从宏观上研究温度、浓度、压力、催化剂等外界条件对速率的影响,另一方面通过实验手段及量子力学与统计力学方法研究反应机理。

1.1.3 物质结构和性质

从本质上讲,物质的宏观性质是由物质的微观结构决定的。化学反应的方向、限度和速率,也都取决于物质的微观结构。研究物质的微观结构同样包括实验方法和理论方法。微观粒子的运动规律遵循量子力学基本原理,在此基础上,一方面发展起来了众多的实验手段,如波谱、光谱、衍射、电镜、磁共振等现代实验方法,另一方面形成了量子化学方法,用来研究化学键、分子结构、电子结构和化学反应的本质等。

1.2 物理化学的研究方法

进入 21 世纪,物理化学的研究方法取得了长足的进展。众多新技术、新方法的开发,新理论的建立和发展,难以全面叙述。在遵循学科原有理论框架和学科进展的情况下,物理化学的研究方法可大致归纳如下。

1.2.1 热力学方法

热力学方法分为经典热力学方法、统计热力学方法和非平衡热力学方法。

经典热力学方法是典型的宏观方法,它以大量微粒组成的系统为研究对象,以人类从事科学研究和生产实践长期积累的经验,经过创造性思维概括的公理化定律(主要是热力学第一定律、热力学第二定律)为基础,研究系统发生变化时的能量(如热、功)与某些热力学函数之间的关系。用这种方法处理问题时,可通过一些宏观可测的物理量的变化来推知系统内部其他性质的变化,并且往往还不必知道系统内部的具体结构,或过程发生的具体途径,而只需知道其始态和终态,因而在应用中具有方便性和普适性。但是,经典热力学不能用来研究物质的内部结构和变化的机理,只停留在对事物表面现象的了解,而不能揭示其内在原因。此外,该方法不含时间的概念,许多情况下采取“无限缓慢”或“无限接近平衡”的理想过程来研究问题,因此也不能回答与时间有关的反应速率、物质扩散和热传导等问题。

统计热力学方法把物质的微观结构与宏观性质联系起来研究宏观规律。它根据物质的微观结构模型,结合量子力学规律,运用统计力学原理,研究微观粒子运动能量、能量分布与系统的宏观热力学量之间的关系。因此,统计热力学是沟通微观与宏观的桥梁。

非平衡热力学方法是进一步把平衡态热力学推广到非平衡过程及开放系统进行,研究一些关键热力学函数及其随时间的变化,来表征实际过程的热力学本质。非平衡热力学诞生较晚,但也取得了较大进展。非平衡热力学发展的一个主要特点是形成了“近平衡区”和“远离平衡区”的理论,而后者往往对应新的有序结构的形成,称为耗散结构理论,进一步揭示了更深层次的自然规律。

1.2.2 动力学方法

动力学方法也可分为经典化学动力学方法和现代反应动力学方法。经典化学动力学方法研究化学反应速率的表示、测量、外界因素对速率的影响及反应步骤、历程、宏观速率理论等。现代反应动力学方法则更注重反应的微观本质,如单分子反应、电子态-电子态反应的实验技术与理论方法。尤其是近年来,在反应势能面、过渡态、激发态、中间体、微观反应路径乃至反应动态过程等难以用实验方法研究的反应动力学领域中,量子化学方法正在越来越多地发挥作用。

1.2.3 量子力学方法

量子力学方法以量子力学为基础,以原子分子为对象,因此也称为量子化学方法。该方法重点考虑分子中各种静电相互作用,求解量子力学方程,获得描述分子中电子运动的波函数和能量信息。在此基础上,进一步获得分子结构、化学键、电子能级、电荷分布及描述分子

其他微观性质和动态性质的物理量。随着计算机技术的飞速发展和相应软件的研制成功,量子化学作为物理化学的基本方法之一,其应用和普及已成为一种明显的发展趋势。

作为对量子化学方法处理较大分子存在计算困难的补充,近年来还发展了分子力学与分子动力学方法。它们以量子化学和实验方法建立的分子内及分子间相互作用势函数数据库为基础,用经典力学方法研究较大分子的结构和动态性质,已经在化学、生物学、医药学和材料科学中得到了广泛应用。

1.3 物理化学的作用和学习方法

国内 70 多位专家经调查研究,在《自然科学学科发展战略调研报告》中指出:“凡是具有较好物理化学素养的大学生,适应能力强,后劲足,容易触类旁通,自学深造,能较快适应工作变动,开辟新的研究阵地,从而有可能站在国际科技发展的前沿。”事实上,物理化学是一门基础性很强的理论课程,对学生的知识结构、思想方法及对其他相关课程的学习,都具有深远的影响。基础不坚实,不仅给后续课程的学习带来困难,而且更难在工作中有所建树,难以“建造高楼大厦”、占据科学技术的“制高点”。

物理化学具有较强的理论性与系统性,概念抽象,公式繁多,条件严格。因此,学习中投入较多的精力是很自然的。针对本课程的特点,提出如下注意事项。

1.3.1 注重思想方法

任何基础学科的理论体系总是由基本概念、基础理论和基本方法组成,学习物理化学要把基本概念、理论模型、数理逻辑、物理意义、适用条件作为重点,特别是要明确如何提出问题和如何解决问题的思想方法。因此,物理化学的学习并不提倡死记硬背。在学习知识的同时,还要善于学习前人在解决问题过程中的创造性思维和创新思想方法。当然,任何知识的学习都不排除产生自己对问题的认识和提出新的见解。

1.3.2 注重数理逻辑

物理化学之所以被称为一门基础理论课程,是因为多数情况下,它都从基本原理、基本概念和基本假设出发,经过严密的数理逻辑来推导和表达各种关系,得到有关公式和有实际意义的结论。因此,推理过程在讲究方法的灵活性的同时,还讲究思维的严密性、表达的准确性。这也是培育学生良好科学素养的重要途径。

1.3.3 注重公式、结论和定律的适用条件

物理化学课程中的定律及多数经数理逻辑演绎出来的公式和结论,都有相应的限制条件和严格的使用条件,在应用中不能不顾条件成立与否而错误地使用。为避免错误,必须重视推理与推证的过程,注意过程中引入的限制条件。

1.3.4 注重习题的分析与解答

做习题是培养独立思考能力和巩固基础知识的重要环节,同时也是实践性和培养创新性的环节之一。通过解答习题可以加深对课程内容的理解,并运用所掌握的理论工具来解