

普通高等教育“十二五”规划教材

工程化学基础教程

GONGCHENG HAUXUE JICHU JIAOCHENG

刘立明 主编

王薇 张荣华 副主编



化学工业出版社

普通高等教育“十二五”规划教材

工程化学基础教程

刘立明 主编

王 薇 张荣华 副主编



化学工业出版社

· 北 京 ·

本书是根据“卓越工程师教育培养计划”的基本要求以及教育部大学化学课程教学指导委员会对普通化学课程教学基本要求而编写的。

全书共 9 章基本内容, 内容包括热化学基础、化学平衡与化学反应速率、溶液、氧化还原与电化学、物质结构基础、无机物单质及化合物、金属材料与无机非金属材料、有机化学和有机化合物、高分子材料。本书力求突出工程应用的特色。

本书可以作为普通本科高校理工科(非化学化工类)各专业的工程化学教材, 也可作为其他读者的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

工程化学基础教程/刘立明主编. —北京: 化学工业出版社, 2015. 2

普通高等教育“十二五”规划教材

ISBN 978-7-122-22510-8

I. ①工… II. ①刘… III. ①工程化学-高等学校-教材 IV. ①TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 289487 号

责任编辑: 旷英姿

文字编辑: 陈 雨

责任校对: 边 涛

装帧设计: 王晓宇

出版发行: 化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 刷: 北京永鑫印刷有限责任公司

装 订: 三河市市宇新装订厂

787mm×1092mm 1/16 印张 16 彩插 1 字数 382 千字 2015 年 5 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888(传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 32.00 元

版权所有 违者必究

I 前言 I

工科是根据应用数学、物理学和化学等基础科学的基本原理,结合生产实践所积累的技术经验而发展起来的学科。本科工科是在相应的工程领域培养从事规划、勘探、设计、施工、原材料的选择研究和管理等方面的高级工程技术人才。目前我国正在实施“卓越工程师教育培养计划”,这是贯彻落实《国家中长期教育改革和发展规划纲要(2010—2020年)》和《国家中长期人才发展规划纲要(2010—2020年)》的重大改革项目,也是促进我国由工程教育大国迈向工程教育强国的重大举措。工科化学基础是高等学校非化学化工类工科有关专业学生学习的一门重要的基础课程,是培养全面发展的高素质现代高级工程技术人员和相关的管理工作者的知识结构和综合能力的重要组成部分,是实施“卓越工程师教育培养计划”的有机组成部分。本书是根据“卓越工程师教育培养计划”的基本要求以及教育部大学化学课程教学指导委员会对普通化学课程教学基本要求,结合当前国内外的化学发展趋势而编写。

化学是研究物理原子、分子、生物大分子和超分子及其凝聚态的组成、结构、性质、化学反应及规律和应用的科学,它是自然科学的基础学科,并与物质文明的突飞猛进和社会的发展紧密相连。它一方面不断借助于其它学科,特别是物理学、电子学和计算机技术的交叉应用而得到了快速的发展;另一方面,其本身也日益渗透到其它学科(如生物学、环境科学、材料科学、信息科学)中,为这些学科的发展提供理论基础、工艺途径和测试手段。工程化学基础是工科学生大学阶段学习的化学基础课,本课程传授工科学生所应具备的化学基础理论和基本知识以及与化学密切相关的社会热点、科技发展、学科渗透交叉等方面的知识,强调化学知识在工程中的应用,从而使学生具有较高化学素养和知识水平,增强用化学方法解决日常生活中所涉及的化学问题以及实际工程问题的综合能力。

本书是多年来教学经验的总结,在吸收国内外同类优秀教材优点的同时,还力求体现以下特点。

(1) 精简化学的基本原理和基础知识的阐述。教材在满足教学要求的前提下,适当降低理论推导的要求,但重视阐明基本理论的脉络,保持理论体系和知识体系的完整性。

(2) 强调化学基本原理和基本知识在日常生活和工程实际中的应用。教材从物质的化学组成、结构和化学反应出发,密切联系现代工程中材料、环境保护、能源以及生命科学中有关化学问题和化学知识点,突出工科特色。习题配置中也突出基本题、概念题和与工程相关的实际应用题等。

(3) 回顾过去,展望未来。教材既介绍化学发展简史,又注意追踪现代化学发展以及相关工科学科发展趋势,既能够使学生对化学学科过去的历史有一定的了解,又能够使学生认识到化学发展前沿,以及化学与当今科技、社会和经济发展的交叉融合,激发学生学习积极性,奠定终身发展的底蕴。

本书由刘立明担任主编,王薇、张荣华担任副主编。各章编写情况如下:绪论和第7章刘立明编写,第1章詹红菊编写,第2章和第5章张昕和张荣华编写,第3章张荣华和刘立明编写,第4章王薇编写,第6章刘立明和王薇编写,第8章但飞君编写,第9章刘立明和

任小明编写。初稿承蒙方光荣教授主审，提出很多宝贵的修改意见和建议。刘立明和王薇通读和修改全书，刘立明策划和统稿。在编写过程中参考了相关教材，并引用了教材中的一些图表和数据，在此向所有的参考图书的编写者表示最诚挚的谢意。另外，罗光富、杨昌英、张修华、周强和周新文等老师也提出许多有价值的参考意见，在此也向他们表示真诚的谢意。感谢化学工业出版社为本书的出版所做的工作。

由于编者水平有限，书中出现疏漏在所难免，敬请广大读者批评指正。

编者

2015 年 3 月

目 录

绪 论	1
第 1 章 热化学基础	7
1.1 热化学的基本概念	7
1.1.1 系统与相	7
1.1.2 状态与状态函数	8
1.1.3 过程与途径	9
1.2 热力学第一定律	9
1.2.1 热和功	10
1.2.2 热力学能	10
1.2.3 热力学第一定律	12
1.2.4 不可逆过程与可逆过程的功和热	12
1.3 热化学	13
1.3.1 化学反应的热效应	13
1.3.2 盖斯定律	15
1.3.3 生成焓	16
1.4 熵	18
1.4.1 熵和混乱度	19
1.4.2 热力学第二定律和熵判据	19
1.4.3 热力学第三定律和标准熵	20
1.4.4 对过程熵变情况的估计	20
1.4.5 标准摩尔熵变	21
1.5 吉布斯自由能	21
1.5.1 吉布斯自由能	22
1.5.2 标准生成吉布斯自由能	23
1.5.3 吉布斯方程的应用	23
练习题	24
第 2 章 化学平衡与化学反应速率	28
2.1 化学平衡	28
2.1.1 化学平衡常数	28
2.1.2 标准平衡常数	29
2.1.3 化学平衡的移动	32
2.2 化学反应的速率	33
2.2.1 化学反应速率与反应级数	34
2.2.2 反应级数	35
2.2.3 化学反应速率的影响因素	36

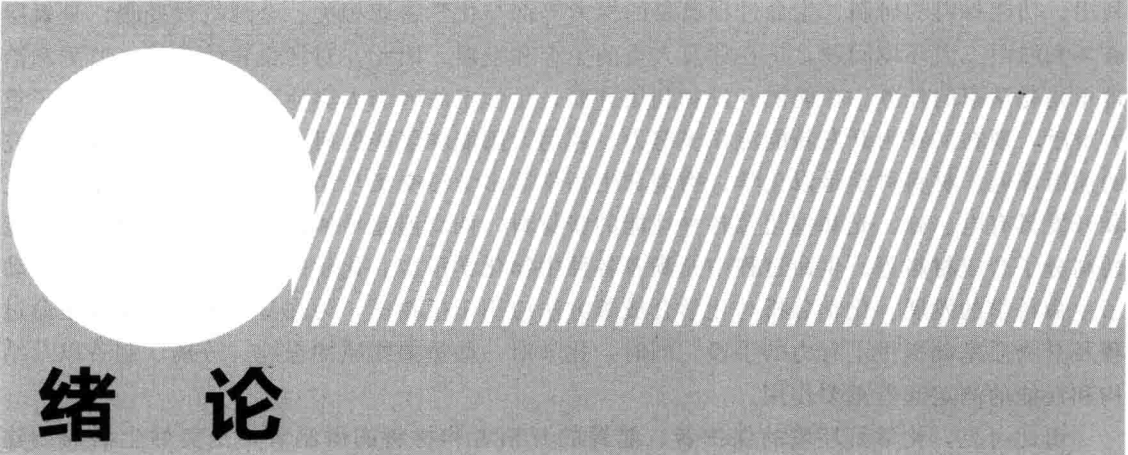
2.2.4 催化剂与催化作用	38
练习题	40
第3章 溶液	44
3.1 分散系	44
3.2 溶液浓度的表示方法	45
3.2.1 质量分数	45
3.2.2 物质的量浓度	45
3.2.3 摩尔分数	45
3.2.4 质量摩尔浓度	45
3.2.5 几种溶液浓度之间的关系	45
3.3 稀溶液的依数性	46
3.3.1 溶液的蒸气压降低	47
3.3.2 溶液的沸点升高和凝固点下降	47
3.3.3 渗透压	49
3.4 酸碱理论	50
3.4.1 酸碱质子理论	50
3.4.2 酸碱的相对强弱	51
3.5 弱酸、弱碱的解离平衡	53
3.5.1 一元弱酸、弱碱的解离平衡	53
3.5.2 多元弱酸、弱碱的解离平衡	55
3.5.3 同离子效应和盐效应	56
3.6 缓冲溶液	57
3.6.1 缓冲作用原理	58
3.6.2 缓冲溶液 pH 的计算	58
3.6.3 缓冲容量	59
3.6.4 标准缓冲溶液	60
3.7 沉淀溶解平衡	60
3.7.1 溶度积和溶度积规则	61
3.7.2 沉淀的生成和溶解	63
3.7.3 分步沉淀和沉淀的转化	65
3.8 胶体	67
3.8.1 胶体的实质和分散体系的分类	67
3.8.2 胶体的性质	68
3.8.3 溶胶的稳定性和聚沉	69
3.8.4 凝胶	71
3.9 表面活性剂	71
3.9.1 表面活性剂及其分类	71
3.9.2 表面活性剂的基本性质	72
3.9.3 表面活性剂的应用	73

3.10 水和水体污染	76
3.10.1 天然水的组成	76
3.10.2 水体污染	77
3.10.3 污水的处理	79
练习题	81
第4章 氧化还原与电化学	86
4.1 氧化还原反应的基本概念	86
4.1.1 氧化和还原	86
4.1.2 氧化数	87
4.2 原电池	87
4.2.1 原电池	87
4.2.2 原电池的能量变化	89
4.3 电极电势	90
4.3.1 标准电极电势	90
4.3.2 标准氢电极	91
4.3.3 参比电极	92
4.3.4 标准电极电势表	93
4.3.5 能斯特方程及电极电势的应用	93
4.4 化学电源	98
4.4.1 一次电池	98
4.4.2 二次电池	99
4.4.3 燃料电池	101
4.5 电解	102
4.5.1 电解原理	102
4.5.2 电解的应用	103
4.6 金属腐蚀	104
4.6.1 腐蚀的分类	105
4.6.2 金属腐蚀的防护	106
练习题	107
第5章 物质结构基础	111
5.1 核外电子的运动状态	111
5.1.1 核外电子运动的量子化特性	111
5.1.2 核外电子运动的波粒二象性	112
5.1.3 核外电子运动状态的描述	113
5.1.4 多电子原子轨道能级	116
5.2 原子核外电子的排布与元素周期律	117
5.2.1 基态原子的核外电子排布规律	117
5.2.2 核外电子分布与元素周期律	119
5.2.3 原子参数的周期性	121

5.3 价键理论	123
5.3.1 离子键理论	123
5.3.2 共价键本质	124
5.3.3 价键理论的基本要点与共价键的特点	125
5.3.4 杂化轨道理论	129
5.4 分子的极性	132
5.4.1 分子间的吸引作用	133
5.4.2 氢键	135
5.5 晶体性质与常见晶体结构类型	137
5.5.1 晶体的性质	137
5.5.2 晶体的类型	138
练习题	141
第6章 无机物单质及化合物	144
6.1 元素化学概述	144
6.1.1 元素的发现	144
6.1.2 元素在自然界中的分布	144
6.1.3 元素的分类	145
6.1.4 元素在自然界的存在形式	145
6.2 金属概论	146
6.2.1 金属物理通性与分类	146
6.2.2 金属在自然界中存在状态	147
6.2.3 金属的一般制备方法	147
6.3 非金属单质	149
6.3.1 周期系中非金属元素	149
6.3.2 非金属单质的结构与物理性质	149
6.3.3 非金属单质的化学性质	149
6.3.4 非金属单质的一般制备方法	151
6.4 主族元素化合物	152
6.4.1 主族元素化合物的物理性质	152
6.4.2 主要主族元素化合物的化学性质及一般反应规律	153
6.5 过渡元素及配位化合物	156
6.5.1 过渡元素通论	156
6.5.2 几种过渡元素化合物的简介	156
6.5.3 配位化合物及应用	160
6.6 镧系元素和锕系元素及稀土元素的应用	166
6.6.1 镧系元素和锕系元素简介	166
6.6.2 稀土元素的应用	167
6.7 稀有气体	170
6.7.1 稀有气体及其发现史	170

6.7.2 稀有气体的应用	171
6.8 无机化学工业的地位和作用	172
练习题	173
第7章 金属材料与无机非金属材料	175
7.1 常见的金属与其合金材料	175
7.1.1 钢铁	175
7.1.2 铜及其合金	176
7.1.3 铝及其合金	176
7.1.4 新型功能合金材料	177
7.2 新型无机非金属材料	178
7.2.1 光导纤维	178
7.2.2 超导材料	178
7.2.3 生物陶瓷	179
7.2.4 光电材料	180
7.2.5 压电材料	180
7.3 建筑胶凝材料	181
7.3.1 石灰	181
7.3.2 石膏	182
7.3.3 水泥	183
7.3.4 钢筋混凝土的腐蚀与防腐	185
练习题	189
第8章 有机化学和有机化合物	190
8.1 有机化合物和有机化学	190
8.1.1 有机化合物的特点	190
8.1.2 有机化合物的分类	190
8.1.3 有机化合物的命名	191
8.2 有机化合物的结构特点	194
8.3 有机化合物分子同分异构体	194
8.4 有机物的重要反应	195
8.5 有机物的结构、基本性质及用途	195
8.5.1 烷烃	195
8.5.2 烯烃	196
8.5.3 炔烃	199
8.5.4 芳烃	200
8.5.5 卤代烃	202
8.5.6 醇	203
8.5.7 酚	205
8.5.8 醛和酮	207
8.5.9 羧酸	211

8.5.10 酯	213
练习题	214
第9章 合成高分子材料	217
9.1 高分子化合物概论	217
9.1.1 高分子化合物的基本概念	217
9.1.2 高分子化合物的合成	218
9.1.3 高分子化合物的结构与性能	219
9.2 三大经典高分子材料简介	221
9.2.1 塑料	221
9.2.2 合成橡胶	223
9.2.3 纤维	224
9.3 其它高分子材料简介	226
9.3.1 合成胶黏剂	226
9.3.2 涂料	228
9.3.3 离子交换树脂	230
练习题	231
附录	233
附录1 物质的热力学数据 (25℃)	233
附录2 弱电解质在水溶液中的解离常数 (25℃)	240
附录3 一些共轭酸碱的解离常数 (25℃)	240
附录4 物质的溶度积常数 (25℃)	241
附录5 配离子的稳定常数 (18~25℃)	241
附录6 标准电极电势 (25℃)	241
参考文献	245
元素周期表	



绪 论

世界是由物质组成，物质处于运动变化之中。物质的变化包含物理变化和化学变化。化学是研究物质原子、分子、生物大分子和超分子及其凝聚态的组成、结构、性质、化学反应及规律和应用的科学。

(1) 化学在社会发展中的作用和地位

化学已经渗透到国民经济的发展、物质文化生活的改善和提高了几乎所有方面。无论是高新尖端技术，还是国民经济发展的各种支柱和支撑产业，以及人们的衣食住行、生活休闲和医疗保健等，都无不与化学科学的发展密切相关。

首先，从与人们生活紧密相关的衣、食、住、行等方面来看，色泽鲜艳的服装需要经过印染和化学处理，色彩丰富的合成纤维更是化学的一大贡献。加工制造色香味俱佳的美食，离不开各种食品添加剂。例如，甜味剂、防腐剂、香料、调味剂和色素等大多是通过化学合成或用化学分离方法从天然产物中提取出来的。钢铁、水泥和沥青等建筑材料的生产、加工、选择与使用等都与化学息息相关。用以代步的各种现代交通工具，不仅需要汽油、柴油作为动力，还需要各种燃料添加剂、防冻剂，以及机械部分的润滑剂，这些无一不是石油化工产品。药品、美容品和化妆品等日常生活用品也都是化学制剂。

其次，从社会发展来看，化学对于实现农业、工业和国防现代化具有重要的作用。农业要大幅度的增产，农、林、牧、副、渔各业要全面发展，在很大程度上依赖于化学科学的成就。使用化肥是保障农业增产的重要措施，它为了解决迅速增长的人口吃饭问题建立了不可磨灭的功绩；农药可以杀灭害虫，在农业生产和林业畜牧业中得到广泛的应用。石油化学工业是基础产业，它为农业、能源、交通、机械、电子、纺织、轻工、建筑、建材等工业、农业和人民生活提供配套服务，在国民经济中占有举足轻重的地位。在工业现代化和国防现代化方面，已研制出各种性能迥异的金属材料、非金属材料和高分子材料。例如，在导弹的生产、人造卫星的发射所要用到的高能燃料、高能电池、高敏胶片及耐高温、耐辐射的材料等也都与化学有关。

随着科学技术的发展和电子计算机的广泛应用，不仅化学科学本身有了突飞猛进的发展，而且由于化学与其它科学的相互渗透、相互交叉，也大大促进了其它基础科学和应用科学的发展及交叉学科的形成。目前国际上最关心的几个重大问题，如环境保护、能源的开发

利用、功能材料的研制、生命过程奥秘的探索等都与化学密切相关。全球气候变暖、臭氧层破坏和酸雨三大环境问题，正在危及人类的生存和发展。因此，对污染物的分析、监测和治理正是化学家的任务。在能源开发和利用方面，化学工作者为人类使用煤和石油曾做出了重大贡献，现在又在为开发新能源积极努力。利用太阳能和氢能的研究工作都是化学科学研究的前沿课题。材料科学是以化学、物理和生物学等多学科交叉与结合的结晶，它主要是研究和开发具有电、磁、光和催化等各种性能的新材料，如高温超导体、非线性光学材料和功能性高分子合成材料等。生命过程中充满着各种生物化学反应，化学向生命科学的渗透，推动了生命科学的发展。化学分析与化学合成等方法应用于生物学，为在分子水平上研究生命过程及其物质基础提供了有力的手段。同时，化学对一些重要物质的提纯、分离、制备以及结构和性能的测定起着重要作用。

由此可见，化学是环境的保护者、能源的开拓者和材料的研制者，是美好生活的创建者，是新兴产业的支撑者。我们的衣、食、住、行无不与化学相关，人人都需要用到化学制品，可以说，我们生活在化学世界里。

(2) 化学发展的几个重要时期

化学历史的发展，大致可以分为以下几个时期：古代及中古时期（17 世纪中叶以前），近代化学时期（17 世纪后半叶到 19 世纪末）和现代化学时期（20 世纪以来）。

① 古代及中古时期 在古代及中古时期，化学实践处在朦胧时期，以实用为目的，化学知识来源于具体工艺过程中的经验。主要包括炼丹术、冶金术和医药化学的萌芽。炼丹术最初来源于炼丹家企图在炼丹炉中炼出长生不老药物，有目的地将各类物质进行搭配烧炼。在此过程中使用了燃烧、煅烧、蒸馏、升华、熔融和结晶等方法，间接地了解很多物质的性质，这也是现代化学实验的雏形。

在所有金属元素中，铜最早被人类广泛利用，无论东方或西方都是如此。自然界存在的天然铜最先被人类加工成器皿。例如，距今 4000 年前埃及法老坟墓中的器具、巴比伦废墟中发现的铜饼和我国甘肃武威县娘娘台出土的新石器晚期遗址中的铜器等。自然界铜矿常含有锡、铅等多种金属氧化物。用碳还原铜矿，可得到青铜。混入锡的铜，熔点能降到 800°C ，硬度增加一倍，可铸性也大大增强。

到了 16 世纪，欧洲工业生产的发展，推动了医药化学的发展，一些医生不再相信炼丹术，而是研究用化学方法制成药剂来医治疾病，并取得很多成果，涉及许多无机物和一些有机物的制备及其物质性质的研究。明代李时珍在他的巨著《本草纲目》中记载的药物达 1892 种，其中包括无机药物 266 种，该书还对这些药物进行了系统的分类。特别值得一提的是，该书记载了较为复杂的无机药物的加工制作过程，有的称得上是典型的无机合成反应。明代宋应星所著的《天工开物》记录了当时的手工业和化学生产过程，如金属冶炼、制瓷、造纸、染色、酿造和火药等。

在 17 世纪初期，德国的化学家贝歇尔（J. J. Becher）和他的学生施塔尔（G. E. Stahl）共同创立“燃素学说”。认为任何能够燃烧的物质里都含有一种名叫燃素的物质，当物质燃烧时，该物质就失去燃素。若在矿石中加入含有燃素的物质（如煤），就可以得到该金属。然而，一种学说是否正确必须经得起实践的检验，“燃素说”在事实面前却吃了败仗。拉瓦锡（A. L. Lavoisier）通过系列实验指出燃烧绝不是可燃物放出燃素，而是它跟空气中的氧气发生猛烈的作用，从而放出光和热。空气是混合物，它由能维持燃烧的氧气（约占 $1/5$ ）

和不能支持燃烧的氮气(约占 4/5)混合组成。物质在空气中燃烧必须消耗氧气。拉瓦锡“氧化学说”的建立,是化学史上一次伟大的革命,也是一个伟大的里程碑,它推翻了统治化学界 100 多年的燃素说,是近代化学的萌芽。

② 近代化学时期 17 世纪中叶以后,由于资本主义生产的迅速发展,积累了物质变化的新知识。从 1661 年波义耳(R. Boyle)首次提出科学的元素概念开始,一直到 1869 年门捷列夫(Дмитрий Иванович Менделеев)建立元素周期表为止的 200 多年时间,可以认为近代化学由萌芽时期发展到比较成熟的时期。

近代化学时期的到来首先要归功于天平的使用,它使化学的研究进入定量阶段,在此基础上出现一系列的基本定律和原子、分子学说。例如,1747 年罗蒙索洛夫(Михаил Васильевич Ломоносов)的质量守恒定律;1777 年拉瓦锡提出氧化学说;1803 年由道尔顿(J. Dalton)陆续建立的倍比定律、当量定律、原子学说、相对原子量等概念;1808 年盖·吕萨克(J. Louis Gay-Lussac)的气体简比定律;1811 年阿伏伽德罗(A. Avogadro)定律和分子概念,等等。这些基本定律和原子、分子学说的产生使化学成为一门独立的学科。与此同时,苯的六元环结构以及碳四面体结构的建立,推动了有机化学的发展。在 19 世纪下半叶,将物理学中的热力学的理论引入化学之后,从宏观角度解释了很多化学平衡问题。

在近代化学时期,化学开始成为一门独立的学科,得到了突飞猛进的发展,从经验到理论发生了重大的飞跃,并且出现了许多分支。物质结构的原子价键理论以及借助于物理学有关理论而建立的物理化学,推动了无机化学、分析化学、有机化学和物理化学四大基础学科的建立和发展。社会的需要推动着化学工业的发展,在此阶段大规模的制造酸、碱、合成氨、染料以及一些有机合成工业的相继出现,使得化学开始为人类造福。

③ 现代化学时期 X 射线、电子和放射性现象是 19 世纪末的三大发现,它们打开了原子和原子核的大门,使科学家能够从微观的角度和更深层次上来研究物质的结构和化学变化规律,给无机物和有机物的合成提供了指导,特别是使得有机物的合成数量急剧上升。

现代化学发展到如今有 100 多年的历史,无论化学的理论、研究方法、实验技术以及应用等都发生了较大变化。由于化学研究工作的发展,化学知识的广泛应用以及不同学科之间的相互渗透,原有的四大基础化学已不能满足发展的要求,从而又衍生出许多分支。例如,高分子化学、放射化学、地球化学、环境化学、药物化学等。

创造新物质是化学家的任务之一。一个多世纪以来,合成化学发展迅速,许多新技术被用于无机和有机化合物的合成。现在,绝大多数的已知天然化合物以及化学家感兴趣的具有特定功能的非天然化合物都能够通过化学合成的方法来获得。在人类已拥有的 1900 多万种化合物中,绝大多数是化学家合成的,这几乎又创造出了一个新的“自然界”。合成化学为满足人类对物质的需求做出了极为重要的贡献。

20 世纪人类文明的标志之一是合成材料的出现。合成橡胶、合成塑料及合成纤维这三大合成高分子材料在化学科学中取得突破性的成就,也是化学工业的骄傲,为宇宙、能源、交通和国防等领域提供了许多新材料。高分子合成材料、金属材料和无机非金属材料并列构成材料世界的三大支柱。

研究生命现象和生命过程、揭示生命的起源和本质是当代自然科学的重大研究课题。20 世纪生命化学的崛起给古老的生物学注入了新的活力,人们在分子水平上向生命的奥秘打开了一个又一个通道。蛋白质、核酸、多糖等生物大分子,激素、神经递质、细胞因子等生物小分子是构成生命的基本物质。从 20 世纪初开始,生物小分子(如血红素、叶绿素和维生素等)的化学结构与合成研究就多次获得诺贝尔化学奖,这是化学向生命科学进军的第一步。1953 年沃森(J. D. Watson)和克里克(H. C. Crick)提出了 DNA 分子双螺旋结构模型,这项重大发现对于生命科学具有划时代的意义,它为分子生物学和生物工程的发展奠定了基础,为整个生命科学带来了一场深刻的革命。20 世纪化学与生命科学相结合产生了一系列在分子层次上研究生命问题的新学科,如生物化学、分子生物学、化学生物学、生物有机化学、生物无机化学、生物分析化学等。在研究生命现象的领域里,化学不仅提供了技术和方法,而且还提供了理论依据。

在分子结构和化学键理论方面,鲍林(L. Pauling)长期从事 X 射线晶体结构研究,寻求分子内部的结构信息,把量子力学应用于分子结构,把原子价键理论扩展到金属和金属间化合物,提出了电负性概念和计算方法,创立了价键学说和杂化轨道理论。1954 年由于他在化学键本质研究和用化学键理论阐明物质结构方面的重大贡献而荣获了诺贝尔化学奖。此后,莫利肯(R. S. Mulliken)运用量子力学方法,创立了原子轨道线性组合分子轨道的理论,阐明了分子的共价键本质和电子结构,并于 1966 年荣获诺贝尔化学奖。1952 年福井谦一(Fukui Kenichi)提出了前线分子轨道理论,用于研究分子动态化学反应。1965 年伍德沃德(R. B. Woodward)和霍夫曼(R. Hoffman)提出了分子轨道对称守恒原理,用于解释和预测一系列反应的难易程度和产物的立体构型。这些理论被认为是认识化学反应发展史上的又一个里程碑。为此,福井谦一和霍夫曼共获 1981 年诺贝尔化学奖。1998 年科恩(W. Kohn)的电子密度泛函理论以及波普尔(J. A. Pople)的量子化学计算方法,使得他们获了当年的诺贝尔化学奖。化学键和量子化学理论的发展足足花去了半个世纪的时间。在此期间,化学家们由浅入深,认识了分子的本质及其相互作用的基本原理,从而让人们进入分子的理性设计的高层次领域,创造出新的功能分子,如新药物、新材料等,这也是 20 世纪化学的一个重大突破。

(3) 化学研究的基本方法

实验方法和理论方法是化学研究常用的两种基本方法。

① 实验方法 化学是一门以实验为基础的科学,化学的许多重大发现和研究成果都是通过实验得到的。例如,在研究某类中草药时,首先通过实验提取其有效成分,提纯得到纯度较高的物质,之后用实验方法确定它们的组成和结构,测定它们的化学性质和物理性质。再通过化学方法合成该物质或者对其进行修饰和改性,确定其毒性和疗效,甚至还要通过分子水平研究它们为什么会有这种毒性和疗效的作用原理。

在化学学科发展的不同时期,化学实验的作用是各不相同的,化学实验研究的方向也有所不同。不同科学家的处理方法与他们的性格、实验环境及实验能力等都有关系,即使两位科学家发现相同的化学现象也往往会得出不同的结论。同样,也很少有两位科学家以相同的方式处理同一个问题。例如,英国化学家普利斯特里(J. Priestley)在 1774 年用聚光镜加热氧化汞得到了氧气。当时他不知道这是氧气,认为是燃素。次年 11 月,当他到巴黎讲学时,把这个实验在法国科学院当众演示,被在场的法国化学家拉瓦锡看到。拉瓦锡得到启

示,设计出一个有划时代意义的实验——钟罩实验,证明了氧气约占空气的 $1/5$ 。

同时我们要注意,“实验”与“试验”易混淆,这两个词的含义不同。《现代汉语词典》中对这两个词的释义分别是:实验是为了检验某种科学理论或假设而进行某种操作或从事某种活动;试验是为了察看某事的结果或某物的性能而从事某种活动。从其释义及结合各自的语素意义可以看出,实验是检验某种科学理论或假设,通过实践操作来进行;而试验是检验已经存在的事物,是为了察看某事件的结果或某物的性能,通过使用、试用来进行。

② 理论方法 人类对物质运动规律的认识是逐渐深化的,在认识过程中,实验和理论二者相互依存,相互促进。它们在发展的不平衡过程中产生矛盾,矛盾又被解决,新的矛盾又会产生,在这种循环过程中推动化学的发展。稀有气体的发现过程充分说明了实验与理论之间存在的关系。在元素周期表中,镓(Ga, 1875年),钪(Sc, 1879年)和锗(Ge, 1886年)等元素被相继发现并被普遍承认以后不久,由于氩(Ar, 1894年)的发现,又向元素周期律发起了挑战。因为按照氩的原子量(39.9),应该排在钾(39.1)和钙(40.1)之间,但是当时的元素周期律中没有给它留下位置。发现氩之后的四年中,科学家们又相继发现了氦和其它几种惰性气体。

虽然所有的化学研究都以实验为基础,但是也离不开理论方法去分析实验结果。实验结果只是表面现象,只有结合理论处理才能了解其本质。理论分析有多种方法,对于不同现象和结果采用不同的方法,或者将其组合。对实验数据进行处理,可总结出经验规则,如凝固点下降与浓度之间的关系、反应速率与温度之间的关系等,都是化学家通过实验数据总结出来的。

此外,还有根据实验数据建立模型,再利用模型模拟和预测未知物之间的可能的机理。2013年诺贝尔化学奖授予美国科学家卡普拉斯(M. Karplus)、莱维特(M. Levitt)和瓦谢勒(A. Warshel),以表彰他们“在开发多尺度复杂化学系统模型方面所做的贡献”。化学家们曾用球和棍来搭建分子模型,而今天,建模这一工作可以在计算机中进行。经过理论化学家的不断创新,计算机已经能够逼真地模拟出复杂的化学分子模型,进而预测出化学实验的最终结果。例如,在模拟药物如何同身体内的目标蛋白耦合时,计算机会对目标蛋白中与药物相互作用的原子执行量子理论计算,用经典物理学来模拟其余的大蛋白,从而精确掌握药物发生作用的全过程。

(4) 学习化学的方法

对于工科学生来说,学习化学意义重大。工科毕业生必须具备一定的工程素质。工程素质是指从事工程实践的工程专业技术人员的一种能力,是面向工程实践活动时所具有的潜能和适应性。工程素质主要涵盖良好的数学、化学和物理等自然科学和人文社会科学的基本素养,比较扎实和比较宽厚的工程技术科学基础和工程应用技术专业知识,受到必要的、基本的工程训练,综合分析和解决工程实际问题的能力。在科学技术日新月异、学科交叉已经成为科学发展一大特征的时代,学习化学知识作为普通高等教育的基础任务之一,改善工程技术人员综合知识和能力结构,为他们提供化学素质,开拓其创新精神,其必要性是不言而喻的。

化学是一门实验科学,所有的理论都是建立在实验基础之上的,因此在化学学习过程中要充分认识到化学实验在学习过程中的重要性。要通过实验操作的训练,掌握实验中一些基本技能,培养学生仔细观察实验现象、正确记录和处理数据,以及通过归纳、分析实验数

据,从而判断结果的可靠性。学生也应该学会借助软件来处理实验数据,如 Excel、Origin、ChemOffice 和 SPSS 等。

在学习过程中,我们要注意理想状态与实际状态的比较。化学中有很多理想模型是对化学实验现象的总结。为了对实际气体进行研究,科学家们提出了理想气体模型,我们在学习过程中应注意理论模型的引出思想以及理想状态与实际状态的比较。阅读文献是我们获得知识相当重要的来源之一,必要时查阅有关内容的相关文献或者原始文献,以获取更前沿、更深层次的理论知识。

在学习过程中,我们要注重由特殊到一般、由性质到结构的知识学习,性质和结构的关系是化学学习的主要内容之一。通常描述性质和结构的关系一般由介绍结构开始,再探讨其性质,也就是从一般到特殊。在早期讨论性质和结构的关系时,通常是由性质出发探索结构,研究一般性质时往往由特殊到一般。例如,在学习水的结构与性质之间关系时,通常我们知道了与水分子结构有关的信息(例如, sp^3 杂化、氢键和极性分子等),之后再讨论水的性质(例如,高沸点、高蒸发热和雪花的六角形外形等)。这种从结果到性质的讨论方法是我们易于接受的。但早期研究水分子时,则是从水分子的性质来探讨其结构。

在学习过程中,我们要注重理论知识与实际应用相结合。化学是一门与人们的生活、生产实践紧密关联的学科,化学知识渗透在社会、科技、生活的方方面面。例如,在大型船舶的船身外部放置锌块,由于锌比船身(铁质)活泼,锌块就成为腐蚀电池的阳极,而船身为阴极得以保护。在我国制作豆腐可能是最早应用了湿法化学工艺中的溶胶-凝胶法(sol-gel)的例子。目前溶胶-凝胶法在控制产品的成分及均匀性方面具有独特的优越性,近年来已用该方法制成了 $LiTaO_3$ 、 $LiNbO_3$ 、 $PbTiO_3$ 和 $Pb(Zr, Ti)O_3$ 等各种电子陶瓷材料,特别是制备出形状各异的超导薄膜、高温超导纤维等。