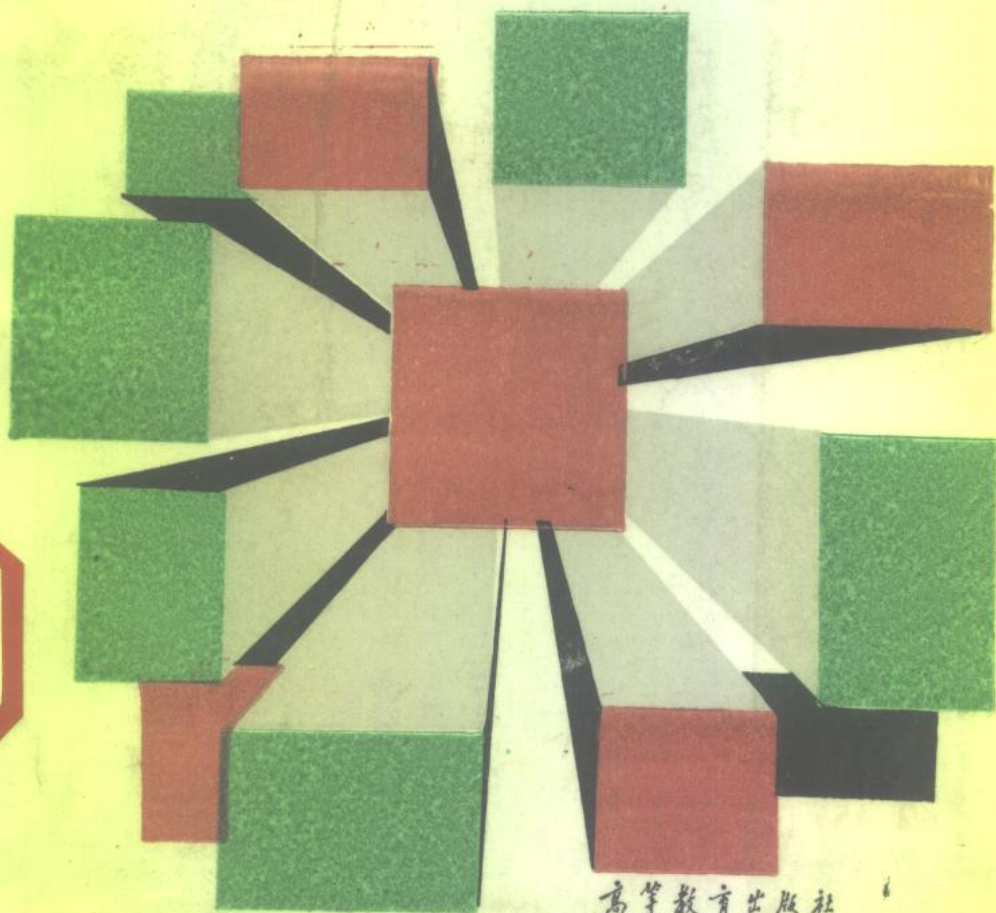


高等学校试用教材

周公度 编著

# 结构和物性

化学原理的应用



高等教育出版社

06-10  
2181

S68601

高等学校试用教材

# 结构和物性

## (化学原理的应用)

周公度 编著



高等教育出版社

(京)112号

## 内 容 简 介

本书作为国家教委制定的高等学校物理学专业和应用物理学专业基本培养规格和教学基本要求必修课“结构和物性”课程的教材,从化学的发展水平和趋势出发,系统地阐述了化学的基本原理和应用,充分体现了化学和物理学的相互联系和相互促进的作用。

全书共分十二章,内容包括:原子结构和元素周期性质,共价键和分子结构、氢的结构化学、氧的结构化学、碳的结构化学、分子的对称性,分子间作用力和分子的大小形状、配位化合物的结构和性质、晶体的点阵结构、金属的结构和性质、离子化合物的结构化学、高分子材料的结构和性质。

本书还可供高等学校有关专业学生、教师以及广大科技人员参考。

高等学校试用教材

结构和物性

(化学原理的应用)

周公度 编著

高等教育出版社出版

新华书店总店科技发行所发行

河北省香河县印刷厂印装

\*

开本850×1168 1/32 印张 11.375 插页 1 字数270 000

1993 年 6 月第 1 版 1993 年 6 月第 1 次印刷

印数0001—2 902

ISBN 7-04-004158-8/O·1201

定价4.50元

## 序

在自然科学中,物理学和化学都是研究物质的结构和性质,区别仅在于研究对象的层次不同,其实她们是血缘最近的姊妹学科。很早以前,在物理系的教学计划里就设有普通化学,作为一门大一的必修课。后来因为感到这门课的内容很难选择,浅了与中学的化学课重复,深了又侵入我系的原子物理和热力学课的领域,就名存实亡了。在我主持北京大学物理系的期间里,一直在考虑如何恢复或重建物理系的化学课。起初,我们在高年级试开过一门化学选修课,侧重在实验室的训练,效果不尽令人满意。1989年春节,我校教务长召开了一次教改座谈会,会上化学系周公度教授提出,可以从结构化学的角度为物理系高年级学生定性地讲一讲分子结构与物性之间的关系,在此基础上可以开设一门“结构和物性”课。我们听后感到这个想法很好,有可能解决物理系长期未解决的化学课问题。当即与周先生商定,请他先为我系的学生做一系列报告,为开设这门新课程作准备。1989年春季那个学期周先生的讲座如期开始了,可惜因故中辍,未能按计划完成。但我们还是决定,1990年为物理系的学生开设这门新的化学选修课。1991年周先生第二遍开此课时改为必修课,并写出一本讲义,这就是本书的前身。

曾经有人批评,物理系开设的课程“有理无物”,意思是说,重视物理规律,理论框架比较大,但忽视物质的具体性质。对物性的讲授不够重视的因素是多方面的,其中不知怎样讲也是原因之一。因为在物理学中人们已不习惯只作描述性的讲授,然而具体的物

质材料所表现出来的性质,其机理往往很复杂,或者现在还无法讲清楚.从《结构和物性》这本书我们看到,物质材料的物理性质是由它们的化学结构所决定的,有些方面的机理可以用结构化学的原理做出定性或半定量的解释.这门课程的增设为解决物理系“有理无物”的问题提供了一种模式,为改善物理系学生的知识结构起到了很好的作用.为此我愿意代表物理界的同人,对周公度教授所做的努力表示感谢.

赵凯华

1992年8月

# 前 言

国家教委已将“结构和物性”列为物理学专业和应用物理学专业本科生必修的一门基础课，其目的是为了加强学生对化学原理和物性知识的了解，以适应当前科技发展的需要。

面对浩繁的化学内容及有限的学时，我们考虑其内容应体现化学发展的水平和趋势；应使学生了解化学的基本原理和应用，适应人材的培养；应能体现出化学和物理学的相互联系和相互促进的作用。我和一些有教学经验的教师商讨，选下列三方面内容作为重点：

一是原子结构和元素周期性质，在元素周期表基础上对各族元素的基本性质有较全面了解。二是化学键，包括共价键、离子键、金属键、配位键和氢键等的本质以及分子和晶体中原子的空间排布和相互作用。三是结合现代工农业和现代科学技术（重点是材料科学、生命科学和表面科学）中的一些化学问题，阐述结构和性能的联系及应用。

我们还考虑本书的系统性，以及提供给理、工、师范等校的学生、教师及有关科技人员参考的需要，共编写了十二章。每章之后附有参考文献，为有兴趣进一步深入学习作引导。鉴于学时的限制，建议第一至第五章以及胶体和界面化学、有关配位化合物和催化作用诸节作为教学的基本内容，而其他章节可根据具体情况选讲。

在我从事本课程教学工作中，得到北京大学物理系赵凯华、王

祖铨和林纯镇等教授的支持和帮助；在教材编写过程中，有关章节得到北京大学化学系杨文治、赵国玺、马季铭、叶秀林、金声、高盘良、丘坤元和物理系陈熙谋、王国文、钟文定、戴道生、梁静国、夏宗炬、傅春寅、章立源等教授的审阅；全书由严宣申教授主审。有他们的帮助和把关，丰富了教材内容，减少了不少差错，谨向上述诸位表示衷心感谢。高等教育出版社蒋栋成、杨再石、李松岩等领导同志对本书的出版给予积极的支持，陈小平同志为本书进行细致的编辑加工，付出辛勤的劳动，我在此一并表示衷心的感谢。由于我对这门课的教学时间不长，错误和不妥之处，祈请读者给予指正。

周公度

1992年6月于北京大学

# 目 录

绪言	1
第一章 原子结构和元素周期性质	4
1.1 原子和分子	4
1. 原子和元素	4
2. 分子和化合物	7
1.2 微观粒子运动的描述方法和量子效应	8
1.3 氢原子的结构	12
1. 单电子原子的 Schrödinger 方程及其解	12
2. 量子数的物理意义	13
3. 波函数和电子云的图形	15
1.4 多电子原子结构	18
1. 屏蔽效应和钻穿效应	18
2. 基态原子的电子排布	20
1.5 元素周期表	21
1.6 元素的周期性质	23
1. 原子的电离能	24
2. 原子的电子亲合能	26
3. 原子的电负性	27
4. 相对论效应对元素周期性质的影响	30
1.7 化合物的周期性质	34
1. 化合物中元素的氧化态	34
2. 从周期表看化合物的性质	36
3. 过渡金属元素化学性质的变化规律	38



1.8 原子光谱和电子能谱的应用	38
1. 原子光谱	38
2. 电子能谱	39
习题一	42
参考文献	44
<b>第二章 共价键和分子结构</b>	46
2.1 物质的性质和化学键类型	46
2.2 $H_2$ 的结构和共价键的本质	49
1. $H_2$ 的 Schrödinger 方程及其解	49
2. 共价键的本质	52
2.3 分子轨道理论和共价键类型	54
1. 共价键的点电子表示	54
2. 分子轨道理论	55
3. 分子轨道的分布特点和分类	57
2.4 双原子分子的结构和性质	60
1. 同核双原子分子	60
2. 异核双原子分子	64
2.5 多原子分子的结构和表示法	65
1. 分子的构型和构象	65
2. 分子点电子结构式	66
3. 价电子对互斥理论	68
4. 杂化轨道理论	70
2.6 共价半径	72
2.7 键型转化和物质的热力学性质	74
2.8 共轭分子的结构和非金属导体	76
1. 共轭分子及其形成条件	76
2. 共轭效应及其对物质性质的影响	77
3. 非金属导体	78
2.9 共价键键能和反应热	79
习题二	82

参考文献	83
<b>第三章 氢的结构化学</b>	<b>85</b>
<b>3.1 氢的一般性质</b>	<b>85</b>
1. 氢的存在形式	85
2. 工业生产中氢气的制备	86
3. 核磁共振	87
<b>3.2 氢能源</b>	<b>89</b>
1. 储氢材料	90
2. 激光分离同位素 H 和 D	92
<b>3.3 氢键</b>	<b>94</b>
1. 氢键及其重要性	94
2. 氢键的形成和物质的性能	95
3. 由氢键形成的铁电材料	98
<b>3.4 溶液</b>	<b>100</b>
1. 溶液浓度表示法	100
2. 溶解度	100
3. 溶度积常数	102
<b>3.5 酸和碱</b>	<b>103</b>
1. 酸和碱的定义与常用的酸和碱	103
2. 水溶液中酸碱强弱的表示	104
3. 酸碱强度的估计	105
4. 缓冲溶液	107
习题三	109
参考文献	110
<b>第四章 氧的结构化学</b>	<b>111</b>
<b>4.1 氧的存在形式和氧化物</b>	<b>111</b>
1. 氧的存在形式	111
2. 氧化物的酸碱性	112

4.2	氧化还原反应	114
1.	氧化反应和还原反应	114
2.	电极电势及其应用	115
3.	氧化还原平衡和化学反应方向	118
4.3	电池和电解	119
1.	电池	119
2.	电解和电镀	121
3.	金属腐蚀和防腐蚀	122
4.4	水的化学	123
1.	水的数量	123
2.	水的结构	124
3.	水的性质	125
4.	水的红外振动和高效脱水问题	128
5.	硬水及其软化	129
6.	水的污染和净化	130
7.	海水的利用	132
4.5	大气化学	132
1.	空气的组成	132
2.	空气是重要的工业原料	133
3.	氧气和臭氧	134
4.	空气中的二氧化碳和温室效应	136
5.	酸雨	136
6.	光化学烟雾	138
7.	环境保护	139
	习题四	140
	参考文献	141

## 第五章 碳的结构化学 142

5.1	碳的成键型式和同位素	142
1.	碳的三种同素异形体	142
2.	三族有机物的结构特征	145

3. 碳的同位素·····	147
5.2 官能团和有机物分类·····	148
5.3 生物化学·····	153
1. 碳水化合物·····	153
2. 油脂·····	155
3. 氨基酸和蛋白质·····	156
4. 核酸·····	161
5. 酶·····	165
习题五·····	165
参考文献·····	166
<b>第六章 分子的对称性</b> ·····	<b>167</b>
6.1 分子的点群·····	167
1. 对称操作和对称元素·····	167
2. 分子的点群·····	172
6.2 分子的旋光性·····	176
1. 分子旋光性的判据·····	176
2. 手型分子的标记·····	177
3. 药物分子的构型·····	178
6.3 分子的偶极矩·····	182
1. 分子对称性和分子偶极矩·····	182
2. 分子的诱导偶极矩和极化率·····	186
习题六·····	188
参考文献·····	189
<b>第七章 分子间作用力和分子的大小形状</b> ·····	<b>190</b>
7.1 分子间作用力·····	190
1. 概述·····	190
2. 范德华力·····	191
3. 范德华半径·····	194

7.2 分子的大小和形状	195
1. 分子大小形状的估算	195
2. 分子筛怎样筛分子	198
7.3 胶体及界面化学	200
1. 水溶液的表面张力	200
2. 表面活性剂	202
3. 纳米材料	206
4. 膜的化学	207
习题七	211
参考文献	212

## 第八章 配位化合物的结构和性质 213

8.1 配位化合物和配位体	213
1. 配位化合物的一般特征	213
2. 配位体	215
8.2 配位键	217
8.3 配位场理论和配位化合物的性质	219
1. 八面体场的分子轨道能级	219
2. 八面体场的分裂能	220
3. 配位场稳定化能	221
4. 其他多面体的配位场	225
8.4 磁性材料	226
1. 抗磁性和顺磁性	226
2. 配位化合物的磁性	228
3. 磁性的交换相互作用与铁磁性	228
4. 稀土永磁材料	231
8.5 石油化工和催化作用	233
1. 石油化工及其基本任务	233
2. 催化作用和催化剂	235
3. 化学反应的过渡态	237
习题八	239

参考文献	240
<b>第九章 晶体的点阵结构和晶体材料</b>	<b>241</b>
9.1 晶体结构的周期性和点阵	241
9.2 晶体对称性和晶体物理性质	244
1. 晶体结构的对称元素	244
2. 晶系	245
3. 空间点阵型式	246
4. 晶体学点群	248
5. 晶体的点群和晶体的物理性质	248
9.3 晶体缺陷和晶体材料	250
9.4 非线性光学晶体	253
9.5 非晶物质的结构特征及其应用	257
1. 玻璃体	257
2. 准晶体	259
3. 液晶	262
习题九	266
参考文献	266
<b>第十章 金属的结构和性质</b>	<b>268</b>
10.1 金属键和金属的一般性质	268
10.2 球的密堆积和金属单质的结构	272
1. 等径圆球的最密堆积	272
2. 等径圆球的体心立方堆积	275
3. 金属单质的结构概况	276
4. 金属原子半径	277
10.3 钢铁的结构和性质	279
1. 钢铁的冶炼	279
2. 钢铁的相组成和性能	280
10.4 半导体的结构和性质	283

习题十	287
参考文献	289
<b>第十一章 离子化合物的结构化学</b>	<b>290</b>
11.1 离子晶体的若干简单结构型式	290
11.2 离子键和离子半径	295
1. 离子键和点阵能	295
2. 离子半径	298
3. 影响离子晶体结构的因素	301
11.3 氧化物超导体的结构	304
习题十一	309
参考文献	310
<b>第十二章 高分子材料的结构和性质</b>	<b>311</b>
12.1 高分子材料的发展和应用	311
1. 高分子工业的发展	311
2. 高分子的合成——聚合反应	312
3. 功能高分子	316
4. 高分子的结构特点	318
12.2 热塑性材料	319
1. 塑料和纤维	319
2. 若干热塑性高分子的结构、性质和应用	322
12.3 热固性材料	324
12.4 弹性体材料	326
习题十二	330
参考文献	330
附录一 元素名称和原子量(1991)	332
附录二 习题选答	336
索引	342

## 绪 言

“结构和物性”是从物质的微观结构及其与宏观性质间的关系来阐述化学的基础知识、基本原理和基本规律的一门化学课。

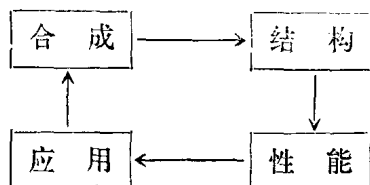
化学是自然科学的基础学科之一。它主要研究物质材料的合成制备方法、结构、性质和应用，是研究物质的组成、变化和反应规律的一门科学。

化学根据物质的变化过程，加以控制和利用，制备出所需产品。通俗而言，化学是研究分子的科学，它用一些简单原料，进行化学反应，造出各种各样的药品和材料，也即对分子进行剪裁、拼接，获得新产品，代替传统的或稀缺的物质。

化学和社会的需要密切相关。人们要为全人类提供食物，开发资源，提供穿衣和住房，要为日益减少和稀缺的材料提供代用品，要为日益发展的新技术、新产品提供新材料，要为改善环境、攻克疾病提供技术和药物，要为加强国防建设提供材料……，所有这些均需要化学科学的发展。

化学的基本任务是根据社会的需求和应用的要求合成制备出具有特定化学组成和结构的产品。由于物质的结构决定了物质的性能，性能又提供物质具有应用价值的基础，而科学的发展不停顿地要求提供具有特定性能的材料，为化学合成和制备提出新的课题和要求，所以化学科学可用下面这个简单的循环，示意地表示她在螺旋上升、不断发展的过程。





在现代科学技术中,化学、物理学和数学(包括计算技术科学)是自然科学的基础。自然科学植根在这基础上,不断地向上生长,向前发展。

数、理、化三个基础学科本身在发展过程中互相渗透、互相促进。其中物理学的成就对化学的促进作用是极为巨大的。电子的发现,打开了原子结构的大门,使化学进入现代化学时期。晶体的 X 射线衍射,为晶体中原子的空间排布提供精确数据,使人们“看到”晶体和分子中原子的立体结构图象。将反映物质宏观性质的热力学规律应用于化学,建立起化学热力学,为化学平衡、相平衡、热化学、电化学等领域的研究奠定了理论基础。氢分子的线性变分法的解,在化学中开辟价键理论,阐明了共价键的本质。红外光谱用于化学基团的鉴定,成为分析各种物质材料的重要手段。核磁共振技术用于化学,成为测定有机物结构的重要实验方法。高真空技术用于研究表面结构,使多相催化反应面目一新……。

同样,现代化学的成就对物理学的促进作用也是非常巨大的。超纯硅和锗的制备及掺杂技术,为半导体及微电子科学的发展奠定了物质基础。大块非线性光学晶体的寻找和培养,使激光技术得以施展它的才能。化学家以其智慧除去光纤材料中极微量的杂质,并找到性能优良和光学性质匹配的包皮保护材料,使远距离的光纤通讯成为现实。氧化物超导体和碱金属球烯- $C_{60}$  超导体的发现和制备、稀土永磁材料的发展等,藉助化学的帮助和启发很多。化学键理论和结构化学的深入发展,不仅为探讨物理学的问题提供理论基础,而且可为预见材料的物理性能和制备新型材料提出