



普通高等教育“十五”国家级规划教材



“十三五”江苏省高等学校重点教材

食品科学与工程专业主干课程

食品化学

(第二版)

主编 江 波 杨瑞金

FOOD
CHEMISTRY
(SECOND EDITION)



中国轻工业出版社 | 全国百佳图书出版单位



在线增值
服务

非外借



普通高等教育“十五”国家级规划教材



“十三五”江苏省高等学校重点教材
(编号: 2016-1-092)

食品化学

(第二版)

主编 江 波 杨瑞金

FOOD
CHEMISTRY
(SECOND EDITION)



中国轻工业出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

食品化学 / 江波, 杨瑞金主编. —2版. —北京: 中国轻工业出版社, 2018.9

普通高等教育“十五”国家级规划教材

ISBN 978-7-5184-1775-9

I. ①食… II. ①江… ②杨… III. ①食品化学-高等学校-教材 IV. ①TS201.2

中国版本图书馆CIP数据核字 (2018) 第058674号

责任编辑: 张 靓

责任终审: 唐是雯

整体设计: 锋尚设计

策划编辑: 李亦兵 张 靓

责任校对: 吴大鹏

责任监印: 张 可

出版发行: 中国轻工业出版社 (北京东长安街6号, 邮编: 100740)

印 刷: 河北鑫兆源印刷有限公司

经 销: 各地新华书店

版 次: 2018年9月第2版第1次印刷

开 本: 787×1092 1/16 印张: 31.75

字 数: 730千字

书 号: ISBN 978-7-5184-1775-9 定价: 68.00元

邮购电话: 010-65241695

发行电话: 010-85119835 传真: 85113293

网 址: <http://www.chlip.com.cn>

Email: club@chlip.com.cn

如发现图书残缺请与我社邮购联系调换

121146J1X201ZBW

第二版前言

食品化学是食品科学与工程专业及其他相关专业中一门重要的专业基础课。该课程的目的是使学生了解食品材料中主要成分的结构与性质，食品组分之间的相互作用，在食品加工和保藏中的变化（物理变化、化学变化和生物化学变化），以及这些变化和作用对食品色、香、味、质构、营养和保藏稳定性的影响。同时它为研究人员在从事食品加工、保藏和新产品开发时提供了一个较宽广的理论基础，也为研究人员在了解食品加工和保藏方面的新的理论、新的技术和新的研究方法时提供重要的基础。

本书第一版由王璋、许时婴和汤坚教授编写，于1999年出版发行。该书出版近二十年间，被国内广大食品科学院校选作专业教材，广受师生及业界人士好评，具有非常大的影响。主编王璋教授作为国内食品科学专业奠基人之一，多次翻译、编写国内外食品科学相关书籍，更是在本书第一版编写工作中倾注了全部心血，编写过程态度严谨，精益求精。由于食品科技和食品产业的飞速发展，人们对食品安全和自身健康的持续关注，知识不断更新，原有教材已不能很好地满足新世纪食品学科发展的需要，急需进行修订。

本书第二版修订，编者认真汲取国外优秀教材的精华，并结合我国食品工业的实际，以期充分反映食品化学及相关领域最新进展。在第一版的基础上，增加了食品化学领域的新知识、新成果、新应用和新趋势，其中包括高科技应用于食品工业后所引起的食品材料和产品的变化。第二版涵盖第一版中水、碳水化合物、脂类、蛋白质、酶、矿物质与维生素、色素与着色剂、食品添加剂章节内容，增加了食品风味及应用反应动力学原理预测食品货架期的内容。在阐述食品中各种成分的性质时，特别强调它们的结构与功能之间的关系，并着重讨论这些成分在食品加工和保藏中的相互作用及对食品质量的影响。同时，新教材充分贯彻理论与实际相结合的原则，能帮助学生及其他学习本教材的人员提高解决实际问题的能力。

本书可以作为高等院校食品、粮油和农产品加工等专业本科生、研究生和教师的教科书或参考书，对于在上述领域工作的科技人员也有参考价值。

参与本书编写的人员均为多年从事食品化学教学和研究的教师，都曾多次翻译和编写食品科学领域专业书籍。本书具体编写分工如下：江南大学食品科学与技术国家重点实验室江波（第一、九章），江南大学食品学院杨瑞金（第六、八、十二章）、华欲飞和孔祥珍（第五章）、夏书芹（第二、十章）、张文斌（第四章），江南大学食品科学与技术国家重点实验室张涛（第三章）、沐万孟（第七章）和缪铭（第十一章）。

由于编者水平有限，书中难免有错误和不妥之处，欢迎读者批评指正。

编者

第一版前言

食品化学是食品专业的专业基础课程之一。食品化学的内容包括：食品材料（原料和产品）中主要成分的结构和性质；这些成分在食品加工和保藏过程中产生的物理、化学和生物化学变化；以及食品成分的结构、性质和变化对食品质量和加工性能的影响等。因此，对于一个食品科学与工程专业的本科生和研究生来说，必须掌握食品化学的基本知识和研究方法，才能在食品加工和保藏领域中较好地从事教学、研究、开发、生产和管理方面的工作。

食品化学是食品科学与工程学科中发展很快的一个领域，在此领域中新的研究方法和成果不断地涌现。因此，新编的食品化学教科书必须能充分地反映这方面的进展。

鉴于在新的教学计划中专业基础课和专业课程的学时有较大幅度的削减，同时为了避免与食品工艺课程（或食品加工与保藏课程）在内容上的重复，本书在编写时没有专设章节讨论各类食品材料的组成和化学，对这方面内容有兴趣的读者可参阅食品工艺教科书。为了能反映食品化学领域中的最新进展，本书某些章节的内容在深度和广度上或许稍微超出食品科学与工程专业（本科）食品化学教学大纲的要求，教师在使用此教材时，可以指导学生自学这些章节。本书还可以供食品学科和相关学科的教师和研究生，以及从事食品研究、开发和生产的工程技术人员参考。

参与本书编写的有无锡轻工大学食品学院王璋（第一、二、五、六、十章）、许时婴（第三、四章）和汤坚（第七、八、九章），全书由王璋主审。无锡轻工大学食品专业研究生陈劼、钟芳、吴昊、周红霞、徐良增和曹咏梅协助抄写和绘图，在此谨表谢意。

由于编者水平有限，书中难免有错误和不妥之处，欢迎读者批评指正。

编 者

第一章 引 论	1
第一节 食品化学的定义	1
第二节 食品化学的历史	1
第三节 食品化学的研究内容	3
第四节 食品化学家的社会作用	3
第二章 水	5
第一节 引 言	5
第二节 水和冰的物理性质	6
第三节 水和冰的结构与性质	7
第四节 溶液中水 - 溶质相互作用	11
第五节 水分活度和相对蒸汽压	19
第六节 水分吸着等温线	23
第七节 水分活度和食品稳定性	29
第八节 分子流动性与食品稳定性	33
思考题	45
第三章 碳水化合物	47
第一节 单 糖	48
第二节 低聚糖	59
第三节 多 糖	65
第四节 膳食纤维和碳水化合物的消化率	95
思考题	96
第四章 脂 类	97
第一节 脂类的定义、组成和分类	97
第二节 脂类的物理性质	103
第三节 脂类的化学性质	109
第四节 脂类的功能性质	128
第五节 油脂加工中的变化	136
思考题	140

第五章 蛋白质	142
第一节 引 言	142
第二节 蛋白质的分类及组成	143
第三节 氨基酸的结构和性质	145
第四节 蛋白质的结构	152
第五节 蛋白质的变性	162
第六节 蛋白质的理化功能性质	171
第七节 蛋白质的营养性质	197
第八节 蛋白质在食品加工中营养和理化功能性质的变化	202
第九节 蛋白质的改性	208
第十节 食品蛋白质	215
思考题	224
第六章 酶	225
第一节 引 言	225
第二节 酶的本质与一般概念	226
第三节 酶催化反应机制及影响酶反应的环境因素	233
第四节 酶反应动力学	247
第五节 固定化酶	256
第六节 食品加工中重要的酶	266
第七节 酶对食品质量的影响	288
第八节 食品酶制剂及其应用	290
思考题	292
第七章 维生素	293
第一节 维生素的膳食摄入量和生物利用率	293
第二节 维生素变化或损失的常见原因	296
第三节 脂溶性维生素	299
第四节 水溶性维生素	307
思考题	329
第八章 矿物质与微量元素	330
第一节 引 言	330
第二节 矿物质的营养价值	331
第三节 食品中重要的矿物质	340

第四节	食品中矿物质的存在形式及化学与功能性质	347
第五节	影响食品中矿物质成分的因素	352
第六节	食品矿物质强化	353
第七节	小 结	356
	思考题	357
第九章	着色剂	358
第一节	色素与着色剂的定义	358
第二节	生物组织中的色素	359
第三节	食品着色剂及法规	395
	思考题	403
第十章	食品风味	404
第一节	引 言	404
第二节	呈味物质	410
第三节	植物来源食品的风味	422
第四节	动物来源食品的风味	431
第五节	风味化合物的生成途径	437
第六节	食品中风味的释放与稳定化	443
	思考题	443
第十一章	食品添加剂	445
第一节	引 言	445
第二节	防腐剂（抗微生物剂）	447
第三节	抗氧化剂	452
第四节	稳定剂和增稠剂	453
第五节	乳化剂	454
第六节	脂肪代替品	454
第七节	无营养甜味剂和低热量甜味剂	457
第八节	膨松剂	465
第九节	水分保持剂（保湿剂）	466
第十节	螯合剂	466
第十一节	抗结剂	467
	思考题	467

第十二章 食品组分相互作用及食品货架寿命预测.....	468
第一节 引言.....	468
第二节 食品组分的相互作用.....	470
第三节 食品组分相互作用对食品品质的影响.....	476
第四节 食品货架寿命预测方法.....	481
第五节 配送、销售对食品货架寿命的影响.....	490
思考题.....	496
参考文献.....	497

引 论

第一节 食品化学的定义

食品化学作为食品科学的一个重要研究领域，主要研究食品的组成、特性以及食品处理、加工和储藏过程中的化学变化。它与化学、生物化学、物理化学、植物学、动物学以及分子生物学联系紧密。

对于生物物质，食品化学家除了与生物科学家具有很多共同的兴趣外，还有着一些显著不同的并且对人类更重要的兴趣。生物学主要关注的是在与生命相似的环境条件下生物物质的繁殖、生长和变化情况。而食品化学主要关注已经失去生命或生命力正在下降的生物物质及其在各种不同环境条件下的变化规律。

第二节 食品化学的历史

由于食品化学的历史与农业化学关联较深，所以直到20世纪食品化学才取得明确的地位。

在18~19世纪，一些著名化学家的许多重要科学发现，构成了现代食品化学的基础。瑞典药物学家Carl Wilhelm Scheele是历史上最伟大的化学家之一，除了发现氯、甘油和氧以外，他还分离并研究了乳糖的特性，通过乳酸氧化制备了粘酸，设计了加热保藏醋的方法，从柠檬汁和醋栗中分离了柠檬酸，从苹果中分离了苹果酸，并测试了20种常见水果的柠檬酸、苹果酸和酒石酸含量。他的探索性研究已被视为农业与食品化学领域分析研究的起源。

法国化学家Antoine Laurent Lavoisier建立了燃烧有机分析的基本原理，首次证明了发酵过程可以用平衡反应方程来描述，并首次测定乙醇的元素成分，也是最早发表有关水果中有机酸的论文作者之一。

法国化学家Nicolas Theodore de Sanssure通过大量工作澄清了Lavoisier提出的农业和食品化学原理。他还研究了植物呼吸期间 CO_2 和 O_2 的变化，通过灰化方法测定植物的矿物质含量，同时首次完成了乙醇的精确元素分析。Joseph Louis Gay-Lussac和Louis-Jacques Thenard发明了蔬菜干物质中碳、氢和氮百分含量的测定方法。

英国化学家Sir Humphrey Davy于19世纪初分离了元素K、Na、Ba、Sr、Ca和Mg。他对农业和

食品化学的贡献主要来自他的农业化学系列著作，并首次开设了《农业化学原理》课程。

瑞典化学家Jons Jacob Berzelius和苏格兰化学家Thomas Thomson的探索性研究为有机化学方程奠定了基础。Berzelius测定了约2000种化合物的元素组成，从而证实了定比定律。他还发明了一种精确测定有机物水含量的方法，以纠正Gay-Lussac和Thenard方法中存在的缺陷。

法国化学家Michel Eugene Chevreul在《有机分析及其应用概论》中，列出了当时已知存在于有机物质中的元素（O、Cl、I、N、S、P、C、Si、H、Al、Mg、Ca、Na、K、Mn、Fe），作为有机物分析的先驱者，他在动物脂肪方面的经典研究导致了硬脂酸和油酸的发现和命名。

美国陆军外科医生William Beaumont开展了经典的胃消化实验，该实验否定了希波克拉底时代的概念，即食品只含有一种营养成分。他以加拿大人作为试验对象，后者因受枪伤而形成了一个能直接进入胃内部的旁流管，因此可将食物引入胃中并监测随后的消化变化。

Justus von Liebig一生取得了诸多令人瞩目的成果，其中包括证实乙醛是发酵产醋过程中乙醇和乙酸之间的中间产物。他将食品分为含氮物质（植物血纤维蛋白、清蛋白、酪蛋白以及动物肉和血）与非含氮物质（脂肪、碳水化合物和含酒精饮料）两类。同时还优化了采用燃烧法定量分析有机物质的方法，并于1847年出版了食品化学领域的第一本著作《食品化学研究》。

食品掺假的现象普遍存在且非常严重，食品化学的发展历程与食品掺假同步，食品中杂质的检测是分析化学特别是分析食品化学学科发展的一个主要推动力。化学研究的进展也确实被用于食品的掺假，因为一些缺乏良知的食品供应商借助于科学进展，从中获得掺假食品的配方，并利用科学原理，开发更有效的方法，以取代之前低效的经验进行食品掺假。

发达国家的食品掺假历史可分为三个不同的阶段。第一阶段是1820年以前，当时食品掺假问题并不严重，也没有建立检测方法的必要。因为食品是从小商贩或个人购买获得，买卖主要基于人与人之间的相互信任。第二阶段始于19世纪早期，当时食品有意掺假出现的频率和严重程度都显著增加。这一变化主要归结于食品加工和销售的日益集约化，同时现代化学的发展也是食品掺假增加的部分原因。直至1920年左右，食品的恶意掺假仍是一个相当严重的问题。此后，法规的制约加之有效的检测方法，将有意掺假的频率和严重性减少至可以接受的水平，从而进入食品掺假历史的第三阶段。直到今天，食品掺假状况仍然存在且掺假手段不断翻新。

19世纪早期在公众意识到食品掺假的严重性后，纠正的力度逐渐加大，包括制定新的法规使掺假非法化、了解食品的天然性质及确定常被用作掺假物的化学物质，以及确定检测掺假物的方法。因而在1820—1850年期间，化学和食品化学的重要性在欧洲逐渐被认可。这一方面得益于科学家的贡献，另一方面高校为青年学生建立的研究实验室和创办的新科学期刊，为抑制掺假起到了极大的推动作用。

1860年德国建立了第一个由政府资助的农业实验站，在前期研究的基础上，他们开发了一种可用于测定常规食品中主要组分的重要方法，即分别测定食物中的水、粗脂肪、总氮、粗纤维及无氮提取物。令人遗憾的是，在很长的一段历史时期，化学家和生理学家都错误地认为，不管是什么食物，用此方法获得的值等同于食物的营养价值。

1871年, Jean Baptiste Duman认为仅含有蛋白质、碳水化合物和脂肪的膳食不足以维持生命。直至20世纪上半叶, 人们发现并鉴定了大多数的必需营养素, 其中包括维生素、矿物质、脂肪酸及氨基酸。

第三节 食品化学的研究内容

食品化学家特别关注对食品材料分子的鉴别以及对食品组分特性的了解, 同时关注如何将这些规律应用于食品配方的改进、加工工艺的优化以及储藏稳定性的提高。最终目的是建立不同种类化学组分之间的因果和构效关系, 从而使得对一个食品或模型体系的研究结果可用于分析和了解其他的食品体系。食品化学研究主要包括以下四个部分:

- (1) 确定安全、高品质食品所应具有的关键特性;
- (2) 确定导致食品质量和/或卫生水平下降的关键化学反应和生物化学反应;
- (3) 综合前两点以了解关键的化学反应和生物化学反应如何影响食品的质量和安
- (4) 将上述认识应用于解决食品配制、加工和贮藏中出现的各种问题。

第四节 食品化学家的社会作用

鉴于以下的原因, 食品化学家有义务参与到那些涉及相关技术问题的社会活动中。

- (1) 食品化学家接受过高水平教育并掌握特殊的科学技能, 这就使他们能担当起高度的职责;
- (2) 食品化学家的活动影响到食品供应的充足程度、人体的健康、食品的成本、废物的产生和处理、水和能源的使用以及食品法规的性质。由于这些事务紧密关系到公众的福利, 因而食品化学家应该有责任服务于社会;
- (3) 如果食品化学家不参与社会问题, 那么其他专业的科学家、职业说客、媒体工作人员、消费者活动家、骗子和反技术的狂热分子等人的意见将会占主导。他们之中大多数不如食品化学家更有资格对食品相关的问题发表观点;
- (4) 对于那些影响或可能影响公众健康和公众对科技发展看法的社会争论, 食品化学家有机会也有责任去帮助解决。目前的相关争论包括: 克隆或转基因的安全性、在农作物中使用动物源激素、有机与传统方式种植的农产品的相对营养价值等。

食品化学家的社会责任包括良好的工作表现、良好的公民道德和指导科学社会的伦理道德, 然而仅具备这些仍不够。还有一个非常重要但食品化学家们往往没有履行的责任是, 如何解释和使用科学知识。尽管这不应仅仅由食品化学家或其他食品科学家做出, 但是他们必须在做出明智决定的过程中表达并让决策者考虑自己的观点。食品化学家如果接受这一无可争辩的社会责任, 应参与以下社会活动:

- (1) 参加有关的职业团体;
- (2) 受邀为政府咨询委员会服务;
- (3) 自发开展社会服务性质的活动。

尽管人们已经掌握了大量的食品科学知识,且知识还在不断增长,但有关食品安全和其他食品科学问题的争论依然存在。大多数有知识的人认为目前的食品供应满足安全和营养需要,而且那些经法律许可添加的食品添加剂不存在任何无保障的危害。当然,对其可能产生的不利影响人们一直保持着警惕。

科学家比没有受过正规科学教育的人应对社会承担更多的义务,人们期待科学家以建设性和合乎职业道德的方式创造知识。此外,他们还应该承担责任以保证科学知识被用来为社会创造最大的财富。为完成这一历史使命,科学家不仅要在他们的日常职业活动中追求卓越,并与高职业道德标准保持一致,还要密切关注公众健康和科学启蒙。

水

第一节 引言

水是生命之源，也是食品中最重要的组分之一。几乎所有食品都有一定含量的水（表2-1）。水的含量、分布以及存在形式会影响食品的质构、风味、色泽和保藏期，进而影响消费者对其的接受程度。在许多食品质量标准中，水分是一个重要的指标。

表 2-1 主要食品的水分含量

单位：%

食品		水分含量	食品		水分含量
水果、蔬菜等	新鲜水果（可食部分）	90	谷物及其制品	全粒谷物	10 ~ 12
	果汁	85 ~ 93		早餐谷物	<4
	番石榴	81		通心粉	9
	甜瓜	92 ~ 94		面粉	10 ~ 13
	成熟橄榄	72 ~ 75		饼干	5 ~ 8
	牛油果	65		面包	35 ~ 45
	浆果	81 ~ 90		馅饼	43 ~ 59
	柑橘	86 ~ 89	高脂食品	面包卷	28
	水果（干）	≤ 25		人造奶油	15
	豆类（青）	67		蛋黄酱	15
	豆类（干）	10 ~ 12		食用油	0
	黄瓜	96		沙拉酱	40
	马铃薯	78	乳制品	奶油	15
	红薯	69		干酪（切达）	40
	小萝卜	78		鲜奶油	60 ~ 70
	芹菜	79		乳粉	4
畜、水产品等	动物肉和水产品	50 ~ 85		液体乳制品	87~91
	新鲜蛋	74	糖及以糖为基本原料的产品	冰淇淋等	65
	干蛋粉	4		果冻、果酱	≤ 35
	鹅肉	50		白糖、硬糖、纯巧克力	≤ 1
	鸡肉	75		蜂蜜及其他糖浆	20 ~ 40

了解水在食品中的存在形式是掌握食品加工和保藏技术原理的基础。食品加工中所采用的各种操作单元，绝大多数都和水相关。例如，浓缩或干燥处理是为了从食品材料中减少或除去水分，便于运输和贮藏（如果汁、乳粉）；冷冻处理是为了使水变成非活性成分，延长保存期（如冷冻草莓）；凝胶化处理是将水固定在网络结构中，赋予食品独特的质构（如果冻、豆腐）；通过增加食盐、糖的浓度，使食品中的水分形成结合水，可有效抑制微生物的生长，延长食品的货架期（如腐乳、果脯）。然而，迄今为止，人们尚未成功采用复水、解冻等方式，将经上述处理的食品复原到它原来的新鲜状态。因此，全面了解食品中水的特性及其对食品品质和保藏期的影响，对食品加工具有重要意义。

第二节 水和冰的物理性质

表2-2所示为水和冰的一些物理性质数据。与周期表中氧原子邻近位置氢化物（CH₄、NH₃、HF、H₂S、H₂Se、H₂Te）的物理性质相比，其具有以下特点：

- （1）水的熔点、沸点均较高。因此在浓缩果蔬饮料时，为防止高温造成食品品质的劣变，常采用减压低温方法。
- （2）水的表面张力较高。因此在制备乳饮料时，为了获得稳定的乳状液，常需添加乳化剂以降低界面张力。
- （3）水的介电常数远高于大多数生物体内的干物质，因此水溶解离子型化合物的能力较强。
- （4）水的比热容和相转变热（熔化焓、蒸发焓和升华焓）等物理常数值很高，这对于食品加工中冷冻和干燥过程有重大影响。
- （5）水的密度较低，水结成冰时体积增加，表现出膨胀特性，导致食品冷冻时组织结构的破坏。
- （6）水的热导率较高，而冰与其他非金属固体相比，热导率也更高。0℃时冰的热导率为同一温度下水的4倍，这表明冰的热传导速度比非流动的水（如在生物组织中）快得多。
- （7）水的比热容大约是冰的2倍，冰的热扩散速率约是水的9倍。热扩散速率表示某一物质温度变化速度，所以在一定的环境条件下，冰的温度变化速率比液态水快得多。由此可见，在相同的温差范围内，冻结的速度远比解冻的速度快。

表 2-2 水和冰的物理性质

性质	数值
相对分子质量	18.0153
熔点（0.1MPa）/℃	0.000
沸点（0.1MPa）/℃	100.000
临界温度 /℃	373.99

续表

性质	数值			
临界压力 / MPa	22.064			
三相点温度 / °C	0.01			
三相点压力 / Pa	611.73			
蒸发焓 (100°C) / (kJ/mol)	40.657			
熔化焓 (0°C) / (kJ/mol)	6.012			
升华焓 (0°C) / (kJ/mol)	50.91			
其他性质	温度			
	20°C	0°C	0°C (冰)	-20°C (冰)
密度 / (g/cm ³)	0.99821	0.99984	0.9168	0.9193
黏度 / (Pa · s)	1.002 × 10 ⁻³	1.793 × 10 ⁻³	—	—
表面张力 (空气 - 水界面) / (N/m)	72.75 × 10 ⁻³	75.64 × 10 ⁻³	—	—
蒸汽压 / kPa	2.3388	0.6113	0.6113	0.103
比热容 / [J / (g · K)]	4.1818	4.2176	2.1009	1.9544
热导率 (液体) / [W / (m · K)]	0.5984	0.5610	2.240	2.433
热扩散率 / (m ² /s)	1.4 × 10 ⁻⁷	1.3 × 10 ⁻⁷	11.7 × 10 ⁻⁷	11.8 × 10 ⁻⁷
介电常数	80.20	87.90	~ 90	~ 98

第三节 水和冰的结构与性质

一、水分子

1. 水分子的结构

水物理性质的特殊性是由水的分子结构所决定的（图2-1）。水分子中氧原子具有4个sp³杂化轨道，两个氢原子的1s电子云与氧原子中的两个sp³成键轨道相互作用，形成了两个共价σ键，每一个σ键的离解能为460kJ/mol。由于氧具有高电负性，因此，O—H共价键具有部分（40%）离子特征。蒸汽状态下单个水分子的键角为104.5°，接近完美四面体角109.5°。其中，O—H核间距离为0.096nm，氧和氢的范德华半径分别为0.14nm和0.12nm。

纯水不仅含有普通的HOH分子，而且含有许多其他微量成分。除了普通的¹⁶O和¹H，还存在¹⁷O、¹⁸O、²H（氘）和³H（氚），因而能形成18种HOH分子的同位素变异体。此外，水中还含有离子，包括氢离子（以H₃O⁺存在）、羟基离子（OH⁻）及其他同位素变异体。因此，“纯”水中含有33种以上HOH的化学变异体，但由于这些变异体的量非常少，所以水的特性主要由HOH决定。

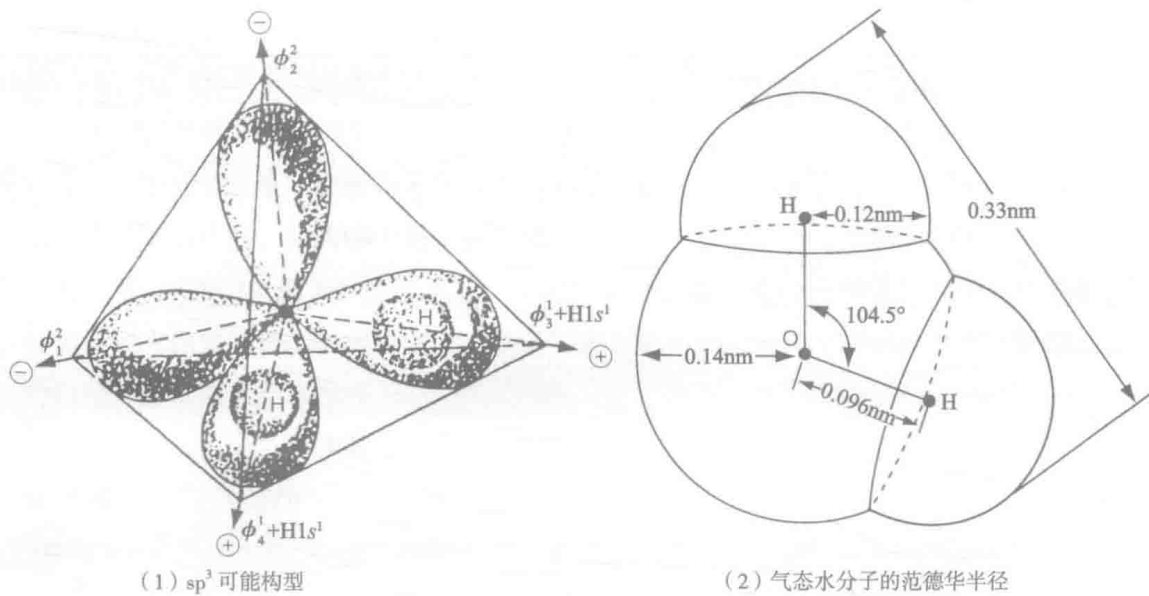


图 2-1 单个水分子的结构示意图

2. 水分子的缔合

水分子中的氢、氧、氢原子呈V字形排序，O-H键具有极性，所以分子中的电荷为不对称分布。纯水在蒸汽状态时，分子的偶极矩为1.84D。该极性使分子之间产生了吸引力，因而水分子具有强烈的缔合倾向。水分子间异常大的吸引力不完全是由于其具有较大的偶极矩，因为偶极矩没有反映水分子中电荷的暴露程度和水分子的几何形状。

水分子参与形成三维空间多重氢键的能力，显著加强了分子间的作用力。水分子中的氧原子电负性大，O-H键的共同电子对强烈地偏向于氧原子一侧，使得氢原子带有部分正电荷。而氢原子无内层电子，极易与另一个水分子上氧原子的孤对电子通过静电引力形成氢键，由此水分子发生缔合。尽管与共价键（平均键能约335kJ/mol）相比，氢键较为微弱（2~40kJ/mol），并且具有较大且多变的键长，但是，每个水分子都具有两个氢键的供体和受体部位，这促成其能以三维氢键的形式排列。因此，每个水分子最多能与另外4个水分子形成氢键，形成四面体结构（图2-2）。与同样能形成氢键缔合的其他小分子（例如NH₃、HF）相比，存在于水分子间的吸引力要大得多。

水分子之间形成三维氢键的能力可以用来解释水的许多物理性质的特殊性。例如，水的高热容、高熔点、高沸点、高表面张力和高相变热，都与断开分子间氢键所需的额外能量有关。水的介电常数也受氢键的影响。水分子通过氢键缔合后形成众多的水分子簇，产生了多分子偶极，有效地提高了水的介电常数。

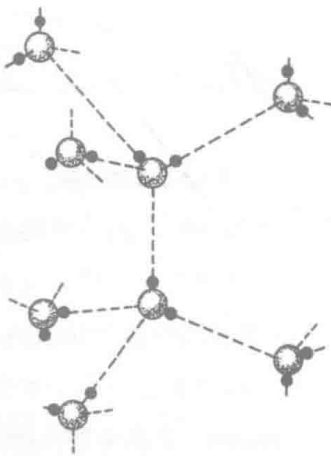


图 2-2 水分子通过氢键形成四面体构型
空心球代表氧原子，实心球代表氢原子，虚线代表氢键