

Design of Molecular Materials

Supramolecular Engineering

分子材料设计

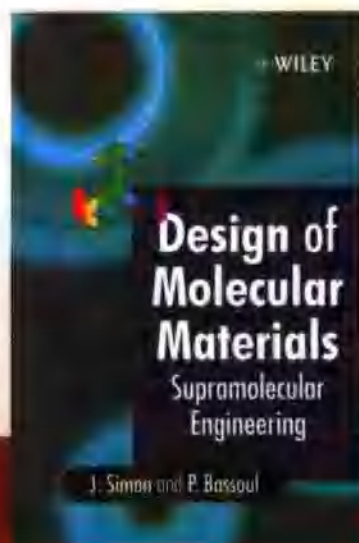
——超分子工程

[法] 雅克·西蒙 皮埃尔·巴苏尔 著

J. Simon P. Bassoul

杨小震 帅志刚 严大东 邵久书 等译

Chemical Industry Press



化学工业出版社

材料科学与工程出版中心

分子材料设计

——超分子工程

[法] 雅克·西蒙 皮埃尔·巴苏尔 著

J. Simon P. Bassoul

杨小震 帅志刚 严大东 邵久书 等译



化学工业出版社

材料科学与工程出版中心

·北京·

图书在版编目 (CIP) 数据

分子材料设计——超分子工程/[法] 西蒙 (Simon, J.), [法] 巴苏尔 (Bassoul, P.) 著; 杨小震等译. —北京: 化学工业出版社, 2006. 4

书名原文: Design of Molecular Materials

ISBN 7-5025-7772-6

I. 分… II. ①西…②巴…③杨… III. 高分子材料-设计 IV. TB324

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 125175 号

Design of Molecular Materials/by J. Simon and P. Bassoul

ISBN 0-471-97371-8

Copyright©2000 by John Wiley & Sons Ltd. All rights reserved.

Authorized translation from the English language edition published by John Wiley & Sons Ltd.

本书中文简体字版由 John Wiley & Sons 授权化学工业出版社独家出版发行。
未经许可, 不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分。

北京市版权局著作权合同登记号: 01-2003-3163

分子材料设计

——超分子工程

[法] 雅克·西蒙 皮埃尔·巴苏尔 著

杨小震 帅志刚 严大东 邵久书 等译

责任编辑: 邢 涛

文字编辑: 徐雪华

责任校对: 战河红

封面设计: 潘 峰

*

化 学 工 业 出 版 社 出版发行

材料科学与工程出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010)64982530

(010)64918013

购书传真: (010)64982630

http://www.cip.com.cn

*

新华书店北京发行所经销

大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

三河市延风装订厂装订

开本 720mm×1000mm 1/16 印张 24 $\frac{1}{2}$ 彩插 4 字数 480 千字

2006 年 4 月第 1 版 2006 年 4 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-7772-6

定 价: 75.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前言

重读此书，发现它已不再属于作者了。现在问自己这样的问题是不是太晚：“谁将受益于此书？它将用于何处？”

或许没有高深的科学知识也能阅读本书。然而，在这种情况下，建议不要跳过太多的页码。当我们仅仅试图展示（而不是论证）时，很多科学现象是可以以一种简单的方式来表达。虽然如此，我们也证实了这种方法并没有在精确性上产生鸿沟。

我唯恐本书指出的问题比它所解决的问题更多。勾画出一个难题，意识到解决它所需要付出的努力，感受着一个解决方案的开端……这已经够了吗???

A Paris le 2 juin 2000

译者的话

当今科学的核心领域之一是材料科学，而分子材料又是材料科学中的一个新领域。当前分子科学和材料的迅速发展迫切需要人们理解隐藏在现象背后的物理、化学规律和本质，以用于设计新的分子材料。本书就是在这种需求下应运而生的。它展示给我们一个耳目一新的名词：系统化学（systemic chemistry）。它涉及的内容包括设计和构造由一些相互作用的个体所构成的体系。也就是说它遵循这样一条主线：分子单元（分子工程）→分子材料（超分子工程）→（物理性质）→器件→体系。这实质上也是一个多尺度材料设计的思想。本书正是在这样的思路下写成的。它集化学、物理学、材料科学以及应用数学于一体，符合这个时代从事上述领域研究的科研人员需求。

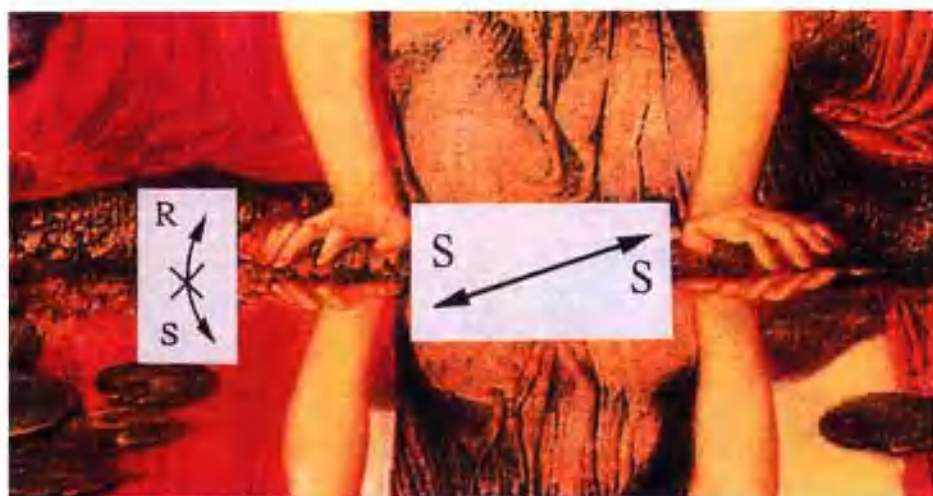
本书的两位作者来自世界著名的研究中心巴黎市立高等工业物理化学学院（ESPCI，历史上曾产生过5位包括居里夫妇在内的诺贝尔奖得主）与法国巴黎国家科学研究中心（CNRS）联合实验室（ESPCI-CNRS）。化工出版社的同仁最早把原版书拿来请我们翻译时，我们的第一感觉就是这本书很新颖，而且其中有很多插图，有助于形象地理解一些深刻的化学、物理本质。然而，要完全读通这本书，也不是一件太容易的事。因为它涉及的领域非常之广，包括化学、物理学、材料科学以及数学，特别是一些专门的群论知识。但另一方面，这本书的最大好处就像作者在序言中所说，“或许没有高深的科学知识也能阅读本书”。也就是说，它能为不同知识背景、不同领域的人提供不同层次的帮助。这也许是本书的一个最大特点。

在翻译过程中我们还深切感到，本书作者不仅具有广博的科学知识，而且具有浓厚的欧洲文化内涵。行文之中也处处体现着法兰西式的浪漫色彩。书中各章的引子，也是直接取自法语、意大利语、西班牙语、德语、俄语，甚至是日语等不同语种的名人名言，这给本书增添了人文色彩，也给翻译增加了难度。译者之心，诚惶诚恐，唯恐“以其昏昏，使人昭昭”。也请读者在可能的情况下对照原书。

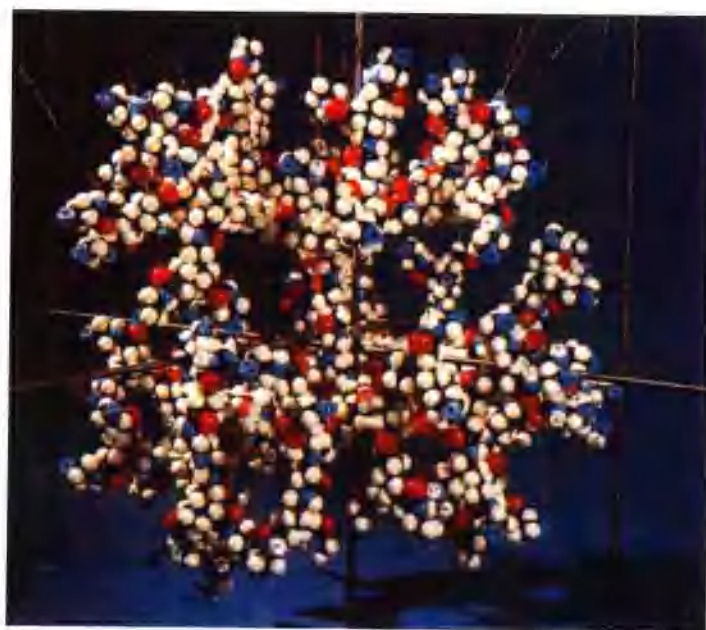
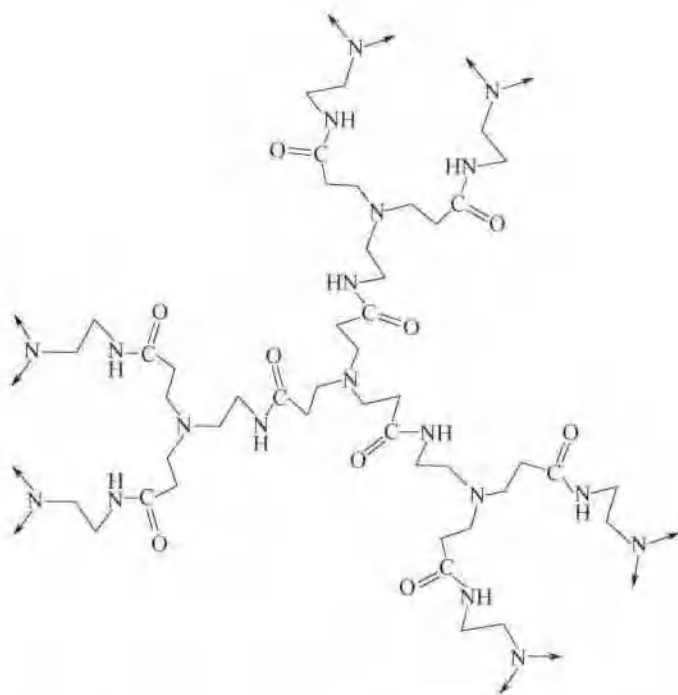
本书的翻译分工如下：第1章、第8章及绪论由杨小震译；第2章、第3章及附录由邵久书译；第4章、第5章及序言由严大东译；第6章、第7章由帅志刚译。张相育校订了全书。同时，还有如下人员参与了本书的翻译和校对：孔滨、韩铭、刘勇、张竹青、曾希果、吉青参与了第1章、第8章及绪论；苗兵、杨爽参与了第4章、第5章；耿华、李清旭、尹世伟参与了第6章、第7章。



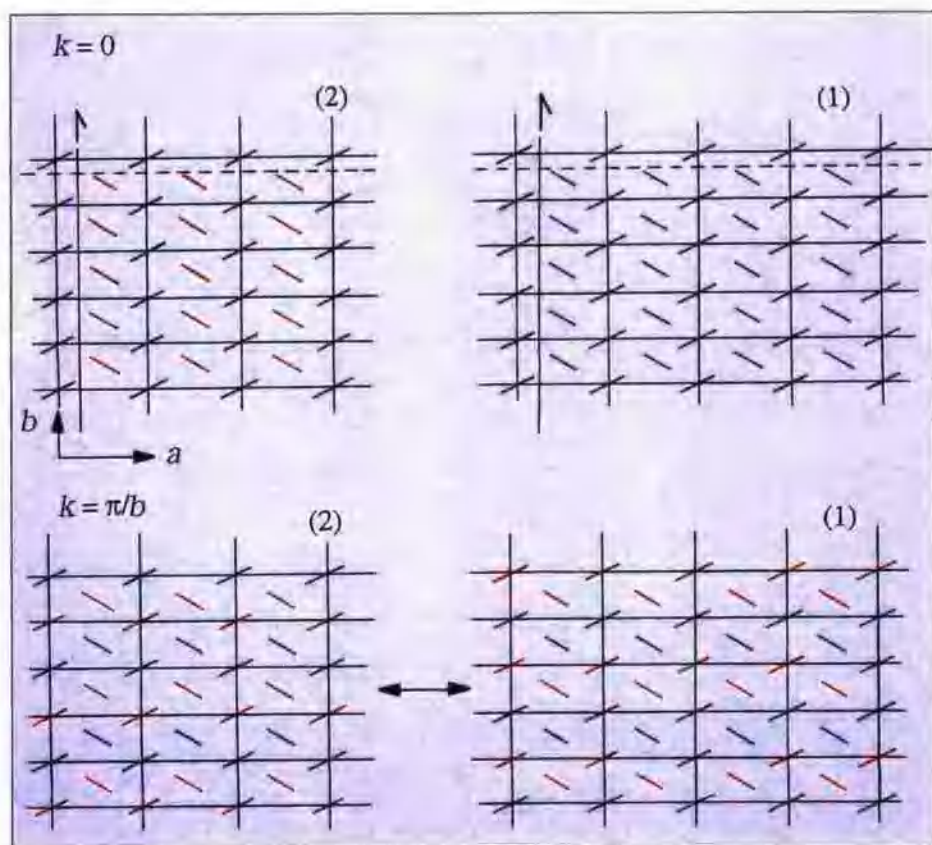
彩图 1.49 $(C_{12}OCH_2)_8PcH_3$ 的十字交叉偏光显微镜图像，它的结构像花一样^[65]
(其中 C_{12} 代表 $C_{12}H_{25}$)



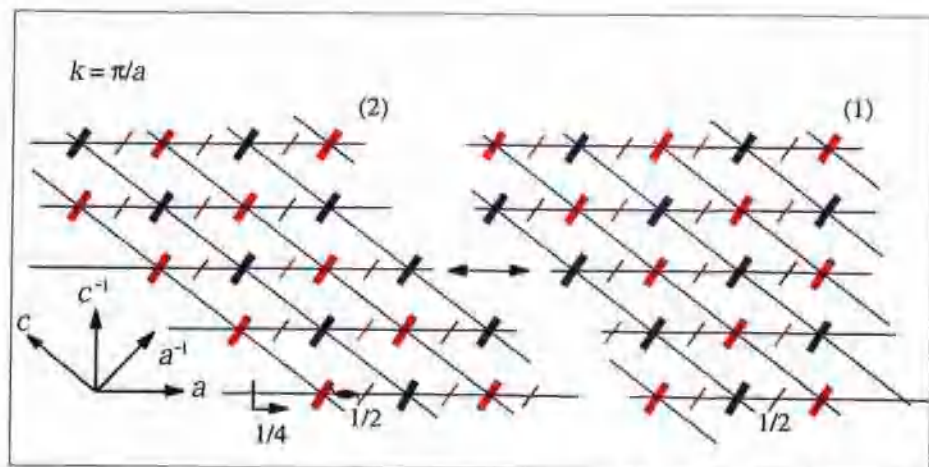
彩图 2.2 平面镜像^[1]，箭头表示相应的两只手是否有手性



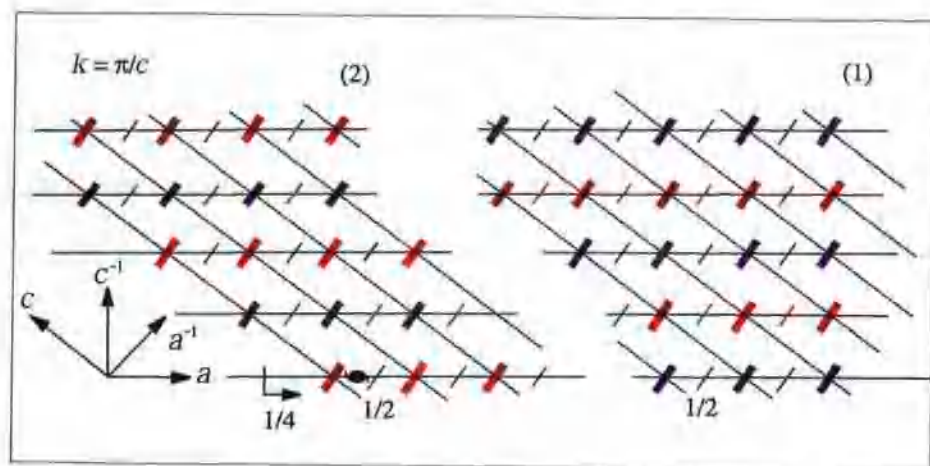
彩图 3.69 PAMAM(Polyamidoamine)树枝状化合物的化学式及其相应的分子模型
(得到了文献[35]中Wiley-VCH的复制许可)



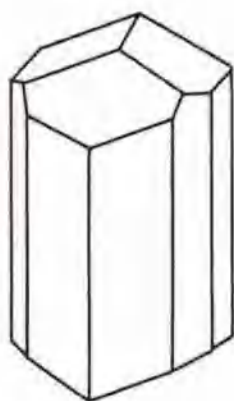
彩图 6.25 Au(1)和Bu(2)的超分子轨道 $k=0$ 和 $k=\pi/b$ 在 (a, b) 平面的示意图(沿着 b^{-1} 的方向), 通常Au具有 $2i$ 的蓝—蓝转换, Bu具有 $2i$ 的蓝—红转换



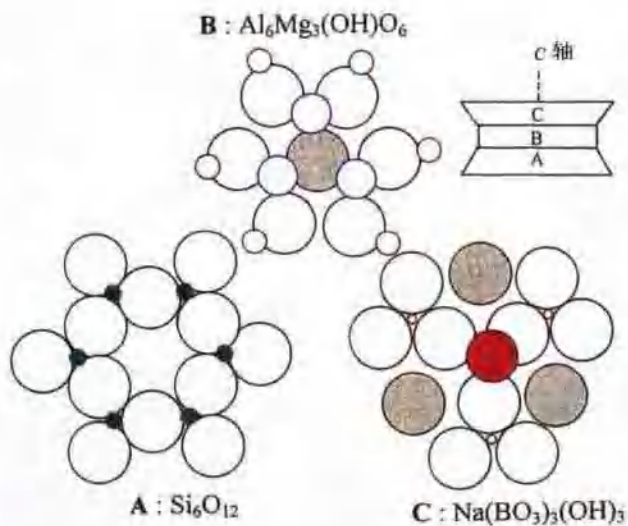
彩图 6.26 Au(1)和Ba(2)的超分子轨道 $k=0$ 和 $k=\pi/a$ 在 (a, c) 平面的示意图 (沿着 a^{-1} 的方向)



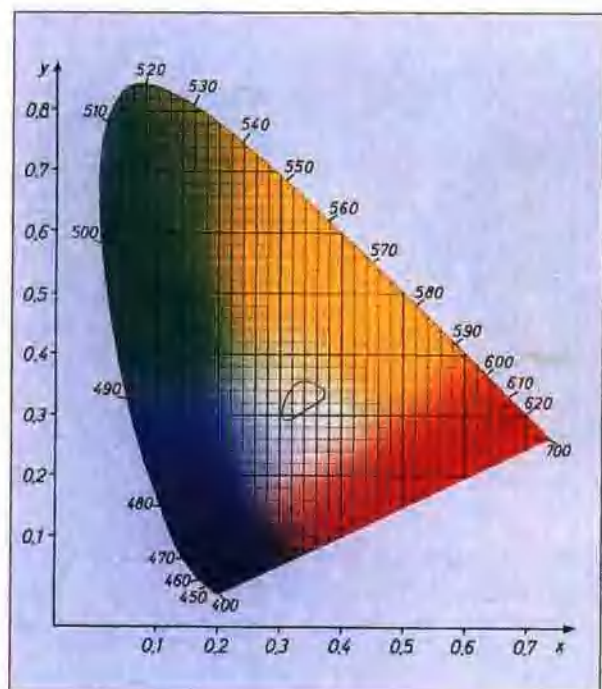
彩图 6.27 Au(1)和Ba(2)的超分子轨道 $k=0$ 和 $k=\pi/c$ 在 (a, c) 平面的示意图 (沿着 c^{-1} 的方向)



彩图 7.15 电气石晶体的示意图(Coll. Minéraux Jussieu)和红电气石 $\text{Na}(\text{Li}, \text{Al})_3\text{Al}_6\text{B}_3\text{Si}_6\text{O}_{27}(\text{O}, \text{OH}, \text{F})_3$ ($9 \times 8 \times 6 \text{ cm}^3$)的照片(G. Mourguet)



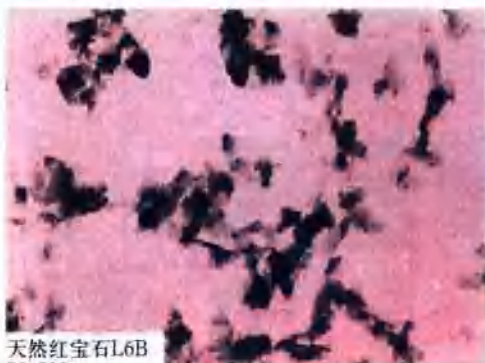
彩图 7.16 组成电气石的3个环。其中绿色表示硅,紫色表示铝,蓝色表示镁,红色表示钠,灰色表示OH (从文献[26]中修改得到)



彩图 8.23 根据 CIE 1931 标准得到的染色图谱(x, y) (得到了文献[13]中 Wiley-VCH 的复制许可)



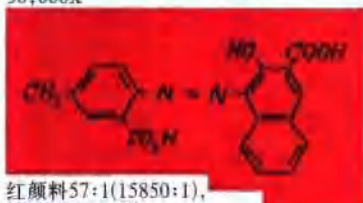
彩图 8.24 一个洞穴图画的局部 (Salle des Taureaux=Lascaux, 17000 BC; 来自文献[14])



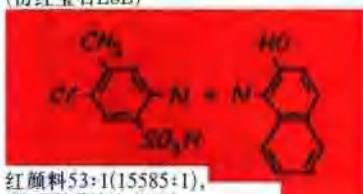
天然红宝L6B
30,000x



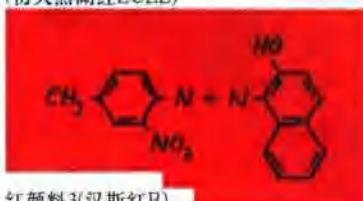
天然湖红LCLL
30,000x



红颜料57:1(15850:1),
(仿红宝L6B)



红颜料53:1(15585:1),
(仿天然湖红LCLL)



红颜料3(汉斯红B)



汉斯红B的
电镜照片

彩图 8.32 一些颜料的微观图像(得到了文献[23]的复制许可)



彩图 8.83 佳能铁电液晶显示器(1998): 显示面积, $29.5\text{cm} \times 23.5\text{cm}$; 屏幕尺寸(对角线) $38\text{cm}(14.8\text{in})$; 像素 1280×1024 ; 像素尺寸 0.23mm ; 每个像素点有四色(红、绿、蓝、白); 对比度 $60:1$; 适宜温度 $10 \sim 35^\circ\text{C}$; 电耗 60W (得到了Junichiro Kanbe 佳能研发公司的复制许可^[100])

内 容 提 要

分子设计及自组装是当代材料科学与技术领域研究工作的热点,它涉及了物理、化学、数学,特别是对称性方面的知识。本书从基本概念入手,全面介绍了分子材料设计的原理以及分子功能化方面的内容。主要包括:分子自组装基本概念和原理、对称性、分子介质中的相互作用和组装、分子半导体、分子电介质、分子材料的工业应用。

本书特点是强调概念和科学原理,避免繁杂公式的推导,集思想性、知识性和可读性于一体。

本书适合于从事材料科学、化学、物理学以及应用数学方面的科研人员使用,也可作为高等院校相关专业研究生及高年级本科生的学习参考书。

目 录

绪论：系统化学	1
参考文献	3
第 1 章 分子的自组装	5
1.1 概论	5
1.2 固态	8
1.3 热致液晶	12
1.4 液致性分子的组装	16
1.5 金属络合物的超分子组装	23
1.6 结论	40
参考文献	40
第 2 章 对称性的一些概念	43
2.1 导论	43
2.2 对称元素	43
2.3 对称元素之间的关系	46
2.4 分子单元对称性	48
2.5 分子单元对称性的确定	51
2.6 几何变换的矩阵表示	53
2.7 不可约表示概念	55
2.8 群-子群关系	58
参考文献	59
第 3 章 超分子工程：对称性问题	61
3.1 导论	61
3.2 一维空间群	62
3.3 二维空间群	68
3.4 二维分子形状简论	79
3.5 三维情况	92
参考文献	106
第 4 章 对称性和物理化学性质：居里原理	107
4.1 静电势	107
4.2 化学中的电多极子	112
4.3 原因与结果的对称关系	114

4.4 居里原理的推广	124
参考文献	126
第5章 分子介质中的相互作用和组装	127
5.1 取向力和非取向力	127
5.2 电荷-电荷(库仑)力	129
5.3 分子极化	136
5.4 诱导偶极-诱导偶极相互作用	138
5.5 极性分子单元	145
5.6 取向非键合相互作用	147
5.7 介晶相中的分凝	148
5.8 氢键	153
参考文献	156
第6章 分子半导体: 性质与应用	159
6.1 引言	159
6.2 研究分子材料中的电子能级的聚集和分立方法	160
6.3 分子半导体概论	174
6.4 窄带分子半导体 Pc_2Lu	176
6.5 宽带分子半导体 PcLi	184
6.6 金属酞菁的能带结构	187
6.7 液晶分子半导体	192
6.8 结与太阳能电池	194
6.9 基于电导的气体传感器	205
6.10 场效应晶体管	215
参考文献	233
第7章 分子电介质	239
7.1 因, 果, 协同与非线性	239
7.2 铁电性	241
7.3 热电性	247
7.4 压电性	250
7.5 光学极化与超极化	254
参考文献	271
第8章 分子材料的工业应用	275
8.1 引言	275
8.2 皂类	275
8.3 有机颜料及染料(着色剂)	286
8.4 光电导性与影印设备	306

8.5 液晶显示	321
参考文献	335
附录 1 主要对称点群：概念和记号	339
附录 2 主要点对称群的特指标表	342
附录 3 晶体学和无限群的群-子群关系	351
附录 4 二维（单色）空间群	352
附录 5 等面铺砌	357
附录 6 从拓扑类 $[3^6]$ 衍生的等面铺砌	364
附录 7 对应于给定位置对称性（非 1 或 C_1 ； 未标记的砌块）的等面铺砌	371
附录 8 压电和非线形光学张量系数	372
附录 9 群 K_n 的不可约表示	374
附录 10 主要染料和颜料	377