

中山大学出版社

中山大学出版社

无机化学基本原理

Basic Principles of Inorganic Chemistry

蔡少华 龚孟濂 史华红 编著

中山大学出版社

·广州·

版权所有 翻印必究

图书在版编目(CIP)数据

无机化学基本原理/蔡少华,龚孟濂,史华红编著. —广州:中山大学出版社,
1999.5

ISBN 7-306-01530-3

I. 无…

II. ①蔡…②龚…③史…

III. 无机化学-化学原理-教材

IV. O61

中山大学出版社出版发行

(地址:广州市新港西路135号 邮编:510275

电话:020-84111998、84037215)

广东新华发行集团股份有限公司经销

广东从化市印刷厂印刷

(地址:广东从化市街口新村路15号 邮编:510900 电话:020-87916882)

787毫米×1092毫米 16开本 21.125印张 511千字

1999年5月第1版 2000年5月第2次印刷

定价:32.50元

如发现因印装质量问题影响阅读,请与承印厂联系调换

内 容 简 介

本书是为大学化学及相关专业师生编写的无机化学课程教学用书,在内容上与《元素无机化学》(中山大学出版社,1998)教材配套使用。

本书共 11 章。全书以现代无机化学基本理论即热力学原理及结构原理为基本点,围绕着元素及其化合物的性质和反应性这一中心,着重向学生介绍和讲述如何应用无机化学的理论,从宏观及微观的角度去学习、讨论、研究无机化学的问题,使传统的描述性的、以罗列性质及反应事实为主体的无机化学转变为说理性的、推理性的无机化学,使学生明确学习原理的目的及应用原理的方法,收到“学以致用”的教学效果。本书在内容上删除了一些经典的、但较为陈旧的普通化学的理论,避免在内容上与中学教学内容重复。本书尽量向学生介绍一些现代的无机化学基本原理的结论及其应用,尤其注重于各种理论间的相互联系,使学生进一步加深对无机化学基本原理的认识和掌握,激发学生学习求知的欲望和热情,从而掌握学习无机化学的方法。

为了方便师生的教与学,与本教材配套使用的还有《无机化学习题解答》及计算机辅助教学软件、试题库等资料。

本书适合于综合性大学、师范院校化学系师生使用,也可用作其他各类高等院校普通化学课程的教学参考书。

前 言

本教材是根据国家教委 1992 年颁布的关于“化学专业培养规格和教学要求”,以中山大学校内使用教材《无机化学基本原理》为基础,经多年教学实践修改编写而成的。本教材与《元素无机化学》(蔡少华、黄坤耀、张玉容编著,中山大学出版社,1998)及《无机化学实验》第三版(中山大学编,高等教育出版社,1991)教材配套使用。

本教材在内容的选择和编写上考虑到:近十多年来,随着科学的进步与发展,大学无机化学的教学内容和教学过程中需要向学生讲述的基础知识及基础理论越来越多(主要是热力学理论及结构原理,以及这些理论的结论在无机化学中的应用);同时,教材在内容上应删除与中学化学及物理学的教学内容有重复的部分(如物质的聚集状态、气态方程、溶液浓度、阿仑尼乌斯酸碱理论、卢瑟福原子结构模型、路易斯电子式及其学说等经典理论的内容)。此外,我们也充分注意到目前中学化学教学大纲的要求以及大学学生的数理实际水平及学习能力的特点,力求在教材内容的编写中做到概念准确、条理清楚、深入浅出、前后呼应、互相联系、突出应用、循序渐进、自成体系,自始至终围绕着热力学原理和结构原理这个纲及其在无机化学学习中的应用,使学生在学无机化学原理的同时逐步提高提出问题、分析问题及解决问题的能力,为学习元素无机化学及后续课程打下扎实的基础。

在教材内容的安排上,我们把配合物化学这一章放在氧化还原电化学一章之前,而不像其他教材中放在下册过渡元素之后讲授。我们认为,这样的安排既有利于保持基本原理的完整性,也体现了由简单到复杂、由浅入深的原则,从而有利于学生对热力学原理与四大平衡的关系的掌握,有利于加强学生对多重平衡原理的应用及理解,有利于加强学生对热力学原理的进一步深入认识及应用。

全书共分 11 章,突出围绕热力学原理与结构原理这两大原理在学习无机化学中的应用。对于化学反应动力学,鉴于教学时数限制及学生数理水平,我们只作一般性介绍,有待于后续课程深入研究。

在每一章书的末尾,都列有“本章教学要求”一节,目的在于方便学生对本章教学内容的掌握。章末附有习题,其中一些题目的综合性、灵活性较强,着重训练学生能力,我们另编有习题解答,可供师生们参考使用。

本书在编写、评审、出版过程中始终得到校内外专家、前辈及同行的指导、关怀和支持。北京大学化学与分子工程学院严宣申教授、西北大学化学系唐宗薰教授对本教材的内容提出了不少指导性的具体意见;北京大学出版社赵学范副编审对本书的内容及出版

提出了不少修改意见,并给予了热情帮助。中山大学化学与化学工程学院的黄坤耀、张玉容、杨燕生、计亮年、邓云祥、曾昭槐、施开良、刘冠昆、罗裕基等教授分别对本书的出版给予了极大的关怀及指导。无机教研室的金毅、雷衡毅、鲁统部等老师在教学过程中对本书的内容也提出了很多很好的建议。所有这些都使本教材更为完善、更富有自己的特色。在此,对他们一并表示最衷心的感谢。中山大学出版社周建华编辑对本教材的出版付出了辛勤而艰苦的劳动,给予了热情的指导与帮助,在此谨表深切的谢意。

由于我们水平有限,时间紧迫,书中错漏在所难免。在此,恳请读者在使用过程中给予批评指正。

编 者

1998 年 7 月于康乐园

目 录

第一章 绪论	(1)
第一节 化学研究的对象	(1)
一、化学的定义	(1)
二、化学变化的基本特征	(2)
三、化学的二级学科	(2)
第二节 化学与人类社会发展的关系	(5)
一、化学对人类创造物质财富的贡献	(6)
二、化学与人类生存环境	(7)
三、化学与人类健康	(8)
四、化学对人类文化发展的影响	(8)
第三节 无机化学的发展趋势	(8)
一、生物无机化学	(9)
二、金属有机化学	(9)
三、无机固体化学	(9)
第四节 学习无机化学的方法	(10)
一、重视做好化学实验	(10)
二、重视化学理论的指导作用	(11)
三、抓好各个学习环节	(11)
四、学一点化学史	(12)
参考文献	(12)
第二章 无机化学的基本概念	(13)
第一节 化学的基本概念	(13)
一、分子	(13)
二、原子	(13)
三、四大化学基本定律	(14)
第二节 元素	(14)
一、元素与单质	(14)
二、核素	(15)
第三节 SI 国际单位制及摩尔	(15)
一、SI 国际单位制	(15)
二、物质的量及其单位	(17)

三、摩尔质量·····	(17)
第四节 相对原子质量和相对分子质量·····	(18)
一、相对原子质量·····	(18)
二、相对分子质量·····	(19)
第五节 理想气体及气体分子运动论·····	(19)
一、理想气体状态方程·····	(19)
二、混合气体·····	(20)
三、气体扩散定律·····	(21)
本章教学要求·····	(21)
习题·····	(22)
 第三章 化学反应进行的方向及热力学初步·····	(25)
第一节 化学反应的方向性及热力学基本概念·····	(25)
一、体系·····	(25)
二、环境·····	(26)
三、状态及状态函数·····	(26)
四、过程与途径·····	(27)
五、广度(容量)性质及强度性质·····	(27)
六、热力学第一定律,热和功·····	(28)
七、化学反应的热效应,焓·····	(29)
第二节 盖斯定律及其应用·····	(33)
第三节 过程的自发性,熵,热力学第二、三定律·····	(38)
一、过程的自发性·····	(38)
二、熵·····	(39)
三、熵变与过程的方向·····	(42)
第四节 自由能,化学反应自发性的判据·····	(44)
第五节 热力学函数的计算及初步应用·····	(47)
本章教学要求·····	(48)
习题·····	(48)
 第四章 化学平衡·····	(51)
第一节 化学平衡常数·····	(51)
一、质量作用定律,经验平衡常数·····	(51)
二、热力学平衡常数 K_T (相对平衡常数 K_T°)·····	(53)
第二节 化学反应等温式,范德荷甫方程·····	(55)
第三节 化学平衡的计算·····	(57)
第四节 化学平衡的移动·····	(61)

一、浓度对化学平衡的影响	(61)
二、压力对化学平衡的影响	(61)
三、温度对化学平衡的影响	(63)
四、平衡移动原理	(64)
本章教学要求	(64)
习题	(65)
第五章 溶液与电离平衡	(68)
第一节 溶液	(68)
一、难挥发的非电解质稀溶液的依数性	(68)
二、电解质溶液	(74)
第二节 酸碱理论	(76)
一、Brønsted-Lowry 质子理论	(76)
二、Lewis 的酸碱电子理论	(80)
三、软硬酸碱理论	(81)
第三节 溶液的酸碱性	(81)
一、水的自偶电离	(81)
二、酸碱指示剂	(82)
第四节 热力学与电解质的电离	(84)
一、一元弱酸、弱碱的电离平衡	(84)
二、多元弱酸、弱碱的电离平衡	(87)
第五节 电解质对酸碱平衡的影响, 缓冲溶液	(90)
一、稀释效应	(90)
二、盐效应	(91)
三、同离子效应	(91)
四、缓冲溶液	(92)
第六节 酸碱中和反应	(95)
一、强酸与强碱的中和反应	(95)
二、强酸与弱碱的中和反应	(95)
三、强碱与弱酸的中和反应	(95)
第七节 沉淀溶解平衡	(96)
一、溶度积	(96)
二、溶度积规则	(98)
三、沉淀溶解平衡的移动	(99)
四、沉淀的转化	(101)
五、分步沉淀	(102)
本章教学要求	(104)

习题	(104)
第六章 反应动力学初步	(107)
第一节 化学反应速率	(107)
一、化学反应速率的定义	(107)
二、反应速率的基本理论	(109)
第二节 影响反应速率的因素	(111)
一、浓度对化学反应速率的影响	(111)
二、温度对化学反应速率的影响	(112)
三、催化剂对化学反应速率的影响	(114)
第三节 反应的级数及反应机理的测定	(116)
一、零级反应	(116)
二、一级反应	(117)
三、二级反应	(118)
四、三级反应	(118)
五、反应机理的确定	(119)
本章教学要求	(120)
习题	(120)
第七章 原子结构与周期表	(124)
第一节 原子结构理论的发展简史	(124)
第二节 核外电子的运动状态	(125)
一、氢光谱	(125)
二、玻尔理论要点	(127)
三、微观粒子的运动特征	(130)
四、薛定谔方程	(132)
五、原子轨道的图形	(135)
六、几率密度和电子云表示法	(138)
第三节 多电子原子核外电子排布及元素周期表	(142)
一、屏蔽效应	(142)
二、钻穿效应	(144)
三、多电子原子能级	(145)
四、核外电子排布	(148)
五、元素周期表	(150)
第四节 元素的基本性质及其周期性的变化规律	(153)
一、原子半径	(153)
二、电离能	(155)

三、电子亲合能	(158)
四、电负性	(159)
本章教学要求	(161)
习题	(161)
第八章 分子结构	(163)
第一节 离子键理论	(163)
一、离子键的特点	(163)
二、离子键的强度与 Born-Haber 循环	(165)
三、离子键的特征	(167)
第二节 化学键的键参数及分子的性质	(169)
一、键参数	(169)
二、分子的性质	(171)
第三节 共价键理论	(173)
一、经典的 Lewis 学说	(173)
二、价键理论	(174)
三、杂化轨道理论	(178)
四、价层电子对互斥理论	(186)
五、分子轨道理论	(190)
第四节 金属键理论	(197)
一、自由电子理论	(197)
二、能带理论	(197)
第五节 分子间力及氢键	(199)
一、分子间力	(200)
二、氢键	(201)
第六节 键型过渡	(203)
本章教学要求	(204)
习题	(204)
第九章 晶体结构	(208)
第一节 晶体的基本概念	(208)
一、晶体与非晶体	(208)
二、晶体的外形及七大晶系	(209)
三、晶体的内部结构	(209)
四、晶体结构的实验测定	(211)
第二节 晶格的分类	(212)
一、金属晶体	(212)

二、离子晶体	(216)
三、分子晶体	(222)
四、共价晶体(原子晶体)	(222)
五、混合型晶体	(223)
第三节 晶体的缺陷	(224)
本章教学要求	(225)
习题	(225)
第十章 配位化合物及配位平衡	(229)
第一节 配位化合物的基本概念	(229)
一、配位化合物的发现	(229)
二、配位化合物的定义	(229)
三、配位化合物的组成	(230)
四、配位化合物的类型	(233)
五、配位化合物的命名	(235)
六、配位化合物的异构现象	(236)
第二节 配位化合物的结构理论	(241)
一、价键理论	(241)
二、晶体场理论	(244)
第三节 热力学与配位平衡	(252)
一、配离子及配合物在水溶液中的平衡	(252)
二、配位平衡的移动	(253)
第四节 配位化合物的应用	(257)
本章教学要求	(258)
习题	(259)
第十一章 氧化还原电化学	(264)
第一节 氧化还原的基本概念	(264)
一、氧化数的概念	(264)
二、氧化还原作用	(265)
三、氧化还原反应方程式的配平	(266)
第二节 原电池与电极电位	(268)
一、原电池的概念	(268)
二、原电池的表达形式	(269)
三、电极电位	(270)
四、标准电极电位表	(271)
五、标准电极电位表的应用	(274)

第三节 影响电极电位的因素	(278)
一、内因	(278)
二、外因	(279)
第四节 Nernst 方程的实际应用, φ -pH 图	(283)
第五节 元素电位图及 $\Delta G^\circ/F-Z$ 图	(285)
一、元素电位图	(285)
二、 $\Delta G^\circ/F-Z$ 图	(287)
第六节 氧化还原平衡及多重平衡	(290)
第七节 化学电源与电解	(292)
一、化学电源	(292)
二、电解	(294)
本章教学要求	(296)
习题	(297)
 附 录	 (303)
1 一些常用的物理化学常数	(303)
2 一些非推荐单位、导出单位与 SI 单位的换算	(304)
3 一些物质的 $\Delta_f H_m^\circ$, $\Delta_f G_m^\circ$ 和 S_m°	(304)
4 某些弱酸和弱碱在水溶液中的电离平衡常数 K'	(310)
5 常见难溶电解质的溶度积常数 K_{sp} (298 K)	(311)
6 常见配(络)离子的稳定常数 $K_{稳}^\circ$	(312)
7 溶液中的标准电极电势 φ° (298 K)	(312)
8 原子半径 r	(316)
9 元素的电负性 X	(317)
10 元素的第一电离能 I_1	(318)
11 主族元素的第一电子亲和能 E_{ea_1}	(319)
12 Goldschmidt 离子半径和 Pauling 离子半径	(320)
13 有效离子半径 r_e	(321)
14 键能与键长一览表	(322)
15 金属原子化热和熔点	(323)
16 元素周期表	(324)

第一章 绪 论

Introduction

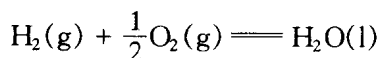
化学对人类社会的发展起着重大作用,可以说,现代人类的衣、食、住、行和健康都离不开化学。化学作为“中心科学”之一的地位,正被越来越多的人所认识。在本章中,我们将简要介绍化学研究的对象、化学与人类社会发展的关系、无机化学的发展趋势以及学习无机化学的方法。

第一节 化学研究的对象

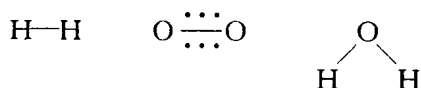
一、化学的定义^[1,2]

先看我们熟悉的物质发生变化的两个例子。

例 1-1 氢气在氧气中燃烧生成水:



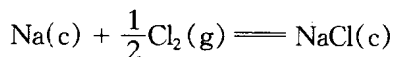
在研究这个变化时,我们涉及到“物质的组成”——氢气、氧气和水,分别由氢分子、氧分子和水分子组成;每个氢分子由 2 个氢原子组成,每个氧分子由 2 个氧原子组成,每个水分子由 2 个氢原子和 1 个氧原子组成。在这个过程中,物质发生了变化,物质的组成也发生了变化。同时,我们也会涉及到“物质的结构”——氢分子、氧分子和水分子,分别由相应的原子通过“共用电子对”形成“共价键”而构成:



另外,在这个过程中,两种物质(氢气和氧气)发生变化,生成了一种新的物质(水);物质的“凝聚态”也变了,氢气和氧气均为气体(gas),而水是液体(liquid)。

发生这一变化的过程伴随着能量的变化,这是一个放热过程($-285.83 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)。

例 1-2 钠与氯气作用生成氯化钠:



这同样涉及到物质的组成、结构和变化(新物质的生成及过程中的能量变化)。这是一个放热过程($-410.9 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)。钠和氯化钠是晶体(crystal),而氯气是气体。

这些变化涉及到物质的三个层次:原子(或带电的原子,即离子)、分子及其凝聚态(气态、液态、固态、等离子体等)。

这样,我们可以给出“化学”的定义:“化学是从原子、分子及其凝聚态层次上研究物质的组成、结构、性质、变化规律及其应用的科学”^[1,2]。其中,“分子”是化学研究的中心层次,因此也可以简称“化学是分子的科学”^[2]*。在变化过程中生成了新的物质,但各元素的原子核不发生改变,这种变化称为“化学变化”(chemical change),或称“化学反应”(chemical reaction)。

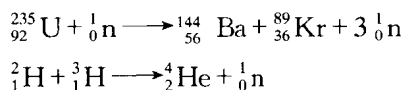
二、化学变化的基本特征

由上述两个例子,我们很容易归纳出“化学变化”的三个基本特征:

1. 新物质生成,但各元素原子核均不改变

因为化学变化过程中,参加反应的物质(反应物)原有的化学键被破坏,而重组为新的化学键(生成新的物质,即生成物)。例如 H_2 分子中的 $\text{H}-\text{H}$ 键, O_2 分子中的 $\text{O}-\text{O}$ 键被破坏,而 $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ 键生成。

注意到化学变化中各元素原子核不变是必要的。因为化学键的重组只涉及原子核外电子的变化,各元素原子核均不变,因此不会产生“新的元素”。对比核裂变和核聚变过程,虽然也生成了新的物质,例如:



但是,参加反应各元素的原子核也发生了改变,生成了新的元素。这类变化不属于“化学变化”范围,而称为“核反应”(nuclear reaction),通常属“核物理学”研究范围。

2. 化学变化是定量变化,服从“质量守恒定律”

由于化学变化只涉及核外电子的重组,各元素原子核不发生变化,不产生新的元素,因而反应体系中所有元素的原子核总数和核外电子总数在反应前后并无变化,它们的总质量必然不变,即遵守“质量守恒定律”。例如,2.016 g H_2 与 15.999 g O_2 完全化合,必然生成 18.015 g H_2O 。

3. 化学变化过程伴随能量变化,服从“能量守恒定律”

由于破坏反应物的化学键需要从环境中吸收能量,而生成新的化学键则要向环境放出能量,所以化学变化过程中必然伴随着能量变化。如前所述,1 mol $\text{H}_2(\text{g})$ 与 $\frac{1}{2}$ mol $\text{O}_2(\text{g})$ 完全化合为 1 mol $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ 的过程中,向环境放出能量($-285.83 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$),而环境的能量等量增加($+285.83 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)。这样,反应体系和环境总的能量变化为:

$$(-285.83 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}) + (+285.83 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}) = 0 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

这就是“能量守恒定律”。在热力学中,也就是“热力学第一定律”。

三、化学的二级学科

在自然科学中,数学、物理学、化学、生物学等被列为“一级学科”。通常认为,现代化

* 关于“化学的定义”,曾有过 20 多种提法,可参阅文献[1]、[2]。

学是从 19 世纪末开始发展的。1895 年,德国科学家伦琴(W. K. Röntgen)发现了 x 射线;1896 年,法国科学家贝克勒尔(A. H. Becquerel)发现了铀的放射性;1897 年,英国科学家汤姆生(J. J. Thomson)发现了电子。这三项重大发现动摇了物理学的传统观念,也冲击着道尔顿(Dalton)“原子是不可分割的最小微粒”这一观点,其重要意义在于打开了“原子结构”和“原子核结构”的大门,使物理学和化学研究进入了“微观世界”,孕育了新的科学概念和科学理论。在随后的 20 多年中,物理学中提出了“量子论”(M. Planck, 1900)、“相对论”(A. Einstein, 1905)和“量子力学”(E. Schrödinger 和 W. Heisenberg, 1926),在化学中则提出了“原子结构理论”和“分子结构理论”,这标志着现代化学进入了蓬勃发展阶段^[3]。自 19 世纪 30 年代起,按照研究对象、研究方法或研究目标的不同,现代化学被划分为无机化学、有机化学、分析化学、物理化学和高分子学科 5 个二级学科。

1. 无机化学

无机化学是研究除碳、氢化合物及其衍生物之外的所有元素的单质和化合物的组成、结构、性质、变化规律及应用的化学分支。

人类早期的化学实践活动大都属于“无机化学”的范畴,例如陶器制造(1 万年前)、青铜制造(5 000 年前)、“点金术”和“炼丹术”(2 100 年前)、黑火药制造(1 300 多年前)等。无机化学(也就是早期的化学)在 18 世纪中叶至 19 世纪中叶奠定了理论基础,其发展的主要里程碑有:1748 年罗蒙诺索夫(М. В. Ломоносов)提出:“质量守恒定律”;1808 年道尔顿(J. Dalton)的“原子论”;1811 年阿佛加德罗(A. Avogadro)提出“分子论”;1840 年盖斯(G. H. Hess)提出“盖斯定律”以及 1869 年门捷列夫(Д. И. Менделеев)创立“元素周期律”。从此,无机化学形成一门独立的化学分支。无机化学的现代化始于 20 世纪二三十年代原子结构和分子结构理论的建立和现代测试分析技术的应用,它使无机化学的研究由宏观深入到微观,把无机物的性质、反应性与其分子、原子结构联系起来。随着无机化学的发展,按照被研究对象的不同,无机化学被划分为普通元素化学、稀有元素化学、配位化学、金属间化合物化学、同位素化学、无机合成化学、无机高分子化学等分支。无机化学的发展趋势将在第 3 节介绍。

2. 有机化学^[4]

有机化学是研究碳、氢化合物及其衍生物的化学分支。已知的有机化合物达 1 000 多万种,而无机化合物则只有几十万种。有机化合物具有不同于无机化合物的特征,如分子组成复杂、容易燃烧、熔点低(通常低于 400℃)、难溶于水、反应速率小、副反应多等。有机化学可以划分为天然有机化学、合成有机化学、结构有机化学等。天然有机化学研究动物、植物、微生物等天然有机物的结构、性能,并进行人工合成。合成有机化学则利用天然的(例如煤焦油、石油、动植物等)或人工的原料,合成各种染料、香料、医药、农药、肥料、炸药、有机光电材料、塑料、合成纤维和合成橡胶等。1965 年,我国人工合成了一种相对分子量最小的蛋白质——牛胰岛素;1970 年,77 单位的多核苷酸基因片断被合成,标志着有机化学在探索生命现象中发挥着越来越重要的作用。结构有机化学主要研究有机物结构理论,进行结构测定和分析,它对其他有机化学分支起着理论指导作用。

3. 分析化学^[5,6]

分析化学是研究物质化学组成的分析方法及有关理论的一门化学分支学科,其任务是鉴定物质的化学成分、测定各成分的含量和物质的化学结构(分子结构、晶体结构),它们依次属于定性分析、定量分析和结构分析研究的内容。根据被分析对象是无机物还是有机物,可把分析化学分为无机分析化学和有机分析化学。根据测定原理的不同,分析化学的分析方法可分为两大类:以物质的化学反应为基础的分析方法称为“化学分析法”,它是分析化学的基础,主要包括重量分析法和容量分析法;以物质的物理和物理化学性质为基础的分析方法,因需要特殊的仪器,称为“仪器分析法”,它包括原子发射光谱法、原子吸收光谱法、原子荧光光谱法、紫外-可见分光光度法、红外光谱法、核磁共振波谱法、x 射线荧光分析法、x 射线衍射分析法、分子发光(荧光、磷光)和化学发光法、质谱法、电化学分析法、色谱法、热分析法、激光光谱分析法、圆二色谱法和电子能谱法等。仪器分析是在化学分析的基础上发展起来的,一些仪器分析方法,需要先用化学分析手段作试样处理、分离、掩蔽或富集,然后才用仪器测定,可以说二者是相辅相成的。随着近代计算机科学、物理学、数学和生物学的成就不断地引入分析化学,仪器分析法已发展成为一门化学信息科学,即产生、获得和处理各种化学信息(除了物质的化学组成、含量和化学结构之外,还包括状态分析、表面分析、微区分析、化学反应参数测定和其他化学信息^[6])。这些信息被其他每一个化学分支以及物理学、生物学等学科广泛采用,并应用于工农业生产、贸易、环境监测和医学等领域。

4. 物理化学^[7]

物理化学是借助物理学的原理和方法来探求化学变化基本规律的一门化学分支,是整个化学学科的基础理论部分,它包括化学热力学、化学动力学和结构化学三部分。化学热力学研究化学反应过程的能量变化、方向和限度;化学动力学研究化学反应的速率、机理和化学反应的控制;结构化学研究物质的结构(原子、分子、晶体结构)及其与物质的性能之间的关系。物理化学的基本原理在各个化学分支都得到广泛应用,化学热力学、化学动力学、催化和表面化学的成果,更促进了石油炼制、石油化工和材料等工业的发展。物理学提供的新技术,如超快速($10^{-15} \sim 10^{-12}$ s)激光光谱技术、分子束技术、x 射线衍射、x 射线光电子能谱、俄歇电子能谱等,以及计算机科学成果的引入,大大促进了物理化学的发展,其发展趋势具有以下几个特点^[7]:①从体相到表相。多相化学反应总是在表相上进行。应用光电子能谱,可以研究物质表相几层原子范围内的组成和结构。这类“表面化学”的研究促进了催化化学的发展和应用,并成为新材料的生长点。②从静态到动态。化学热力学研究方法是典型的由静态判断动态的例子,因此无法给出变化过程的细节。超快速激光光谱技术和分子束技术的出现并应用于化学动力学研究,诞生了“分子反应动力学”(又称“微观反应动力学”或“化学动态学”),使超快过程($10^{-15} \sim 10^{-12}$ s)的动态研究成为可能。例如,蛋白质行使其功能时,“构象”变化发生在 10^{-6} s 之内,目前已可以对此作动态研究,这将加深对复杂的生命化学过程的认识。③从平衡态到非平衡态。平衡态热力学(可逆过程热力学)只限于研究孤立体系或封闭体系,而大多数真实体系属于开放体系(非平衡体系)。60 年代以来,非平衡体系的研究发展迅速,已形成了“非平衡态热力学”,它与生命科学、化学反应动力学等有密切的联系,成为当前物理化学发展的前沿之一。