

数学化学

苟如虎 著

甘肃人民出版社

图书在版编目 (C I P) 数据

数学化学 / 苟如虎著. -- 兰州:甘肃人民出版社,
2011.7

ISBN 978-7-226-04138-3

I. ①数… II. ①苟… III. ①化学—师范大学—教材
IV. ①06

中国版本图书馆CIP数据核字 (2011) 第 153938 号

责任编辑:张菁

封面设计:孟瑞

数学化学

苟如虎 著

甘肃人民出版社出版发行

(730030 兰州市读者大道 568 号)

兰州万易印务有限责任公司印刷

开本:880 毫米×1230 毫米 1/32 印张 6.625 插页 1 字数 191 千

2011 年 7 月第 1 版 2011 年 7 月第 1 次印刷

印数:1~1100

ISBN 978-7-226-04138-3 定价:18.00 元

前 言

化学是一门实用的学科,它与数学、物理等学科共同成为自然科学迅猛发展的基础。化学的核心知识已经应用于自然科学的各个区域,化学是创造自然,改造自然的强大力量的重要支柱。目前,化学家们运用化学的观点来观察和思考社会问题,用化学的知识来分析和解决社会问题,例如能源问题、粮食问题、环境问题、健康问题、资源与可持续发展问题等。化学与其他学科的交叉与渗透,产生了很多边缘学科,如生物化学、地球化学、宇宙化学、海洋化学、大气化学等等,使得生物、电子、航天、激光、地质、海洋等科学技术迅猛发展。

物理化学主要运用物理知识解决化学问题,仪器分析主要将物理的仪器应用于化学中进行测试,而生物化学、地球化学、宇宙化学、海洋化学与大气化学主要研究生物、地球、宇宙、海洋与大气中的化学问题。总而言之,不是用化学的知识来分析和解决问题,就是用其它知识来分析和解决化学问题。

本书以深奥的化学问题为研究对象,大量采用数学的基础理论知识,如数轴、集合、图表、比例等,潜心研究化学的基本规律和理论,构成了化学科学的基础理论,展示了教学改革的研究成果,因此,本书命名为“数学化学”,其目的在于培养师生分析解决问题的能力,培养师生的创新能力。本书具有以下显著特点:

- 1.先无机化学后有有机化学,以“问题—解决—应用”为主线,以专题的形式解答提出的问题,而无机化学部分以微观到宏观的“元素—理论—反应—计算—实验”为体系。

- 2.涉及四大化学的重难点,方法具有科学性又有实效性。

《数学化学》解决了四大化学的重难点,方法简单,推理清楚,易于接受,适合于各种类型的学生,诸如解决无机化学的重难点有“元素周期表及其规律、不饱和度的推理、杂化方式的判断、分子轨道理

论、元素化学的学习方法及其化学反应的规律”；有机化学的重难点有“化合物的命名、异构问题及其推理题”；分析化学的重难点有“溶液的 pH 的计算”；物理化学的重难点有“热力学方程的速写、热力学能的计算”。

3.把复杂问题简单化,把变化问题固定化,把定性问题定量化。

化学中复杂问题很多,变化不定,难以量化,而本书选择了一些合适的方法把复杂问题简单化,把变化问题固定化,把定性问题定量化。诸如把复杂的“杂化方式的判断、异构问题及其推理题与化学反应的规律”通过数轴、不饱和度、表格进行了归纳简化,把变化的“溶液的 pH 的计算与热力学能的计算”通过一元二次方程、公式的选择进行了固定,而把定性的“杂化方式的判断、异构问题及其推理题”通过数轴、不饱和度进行了定量。

4.可激发学生积极地思考问题,培养学生分析解决问题的能力。

《数学化学》不但解决了复杂多变的化学问题,更重要的是运用数学工具解决化学问题,展示了化学与数学的紧密关系,更能激发学生积极地思考问题,培养学生分析解决问题的能力。

5.展示了近年来自己在教学改革中探索的一些成功经验,是甘肃省教育科学“十一五”规划 2010 年度规划课题 [课题批准号:GS(2010)GX053] 的成果之一,同时是“甘肃民族师范学院学术著作出版资助项目”,也是合作民族师范高等专科学校的校长基金项目(08-24)与甘肃民族师范学院院长基金项目(10-04)的成果之一。

在本书的写作过程中,兰州大学的杨汝栋教授与闫兰副教授进行了指导,在此特致谢意。甘肃民族师范学院化学与生命科学系的全体教师及其甘肃民族师范学院数学系的王大胄副教授提出了许多宝贵的意见,在此表示衷心的感谢。

作为化学教学理论改革的成果之一,本书内容本身还有待于完善、补充与拓宽,不妥和疏漏之处在所难免,恳切希望使用本书的师生们提出宝贵意见和的建议。

编者
2010 年 9 月

目 录

上部 无机化学部分

第一章 周期表规律篇

专题一 元素位置推测 (2)

专题二 元素性质推测 (12)

第二章 理论规律篇

专题三 杂化方式的判断 (37)

专题四 分子轨道的书写 (58)

专题五 热力学规律 (64)

专题六 氧化还原反应及其原电池的设计——数轴半圆天平
法 (67)

第三章 反应规律篇

专题七 元素性质学习法 (74)

专题八 反应规律 (94)

第四章 计算规律篇

专题九 守恒算法 (111)

专题十 万能公式算法 (118)

专题十一 酸度公式算法 (122)

专题十二 热力学能算法 (126)

第五章 实验规律篇

专题十三 构画“3+2+2+3”的气体装置——制气、除杂、收集与
尾气处理装置 (133)

下部 机化学部分

专题十四 有机化合物的命名问题	(156)
专题十五 异构问题	(161)

附录:

附录 1 分子轨道能级图(三角形图示法)	(167)
附录 2 数轴半圆天平法	(168)
附录 3 热力学能计算法	(169)
附录 4 电极电势的数据	(170)
附录 5 由分子的“不饱和度”判断中心原子的杂化类型 ...	(182)
附录 6 用“数轴法”判断中心原子的杂化类型	(183)
附录 7 热力学方程速写方法	(188)
附录 8 常见离子的鉴别方法	(189)
附录 9 常见溶液的 pH 的计算方法	(195)
附录 10 常见溶液求解 pH 的讨论	(196)
附录 11 元素电极电势的规律	(197)
附录 12 原子半径/离子半径 $r(\text{pm})$	(198)
附录 13 红外、核磁与紫外谱图解析数轴图	(199)
附录 14 无机化学教学改革框架	(201)
附录 15 立体元素周期表	(202)
附录 16 扇形元素周期表	(203)
附录 17 棱台元素周期表	(204)
附录 18 平面元素周期表	(205)
附录 19 状态元素周期表	(206)
附录 20 元素周期律	(207)

第一章 元素周期表规律篇

元素周期表是化学的灵魂,是化学的一个坐标系,每个元素在坐标系所处一定的位置(区、周期数或行数、族数或列数),一旦能够确定出该元素所处的位置,就可以预测该元素的主要性质,如原子或离子半径,化合价,氧化性,还原性,金属性,非金属性,酸碱性,活泼性等等。经多年研究,发现元素周期表里蕴含着许多规律性的知识,借助数学工具能够巧妙解决元素在坐标系所处的位置(区、周期数或行数、族数或列数),借助中国汉字的特点能够快速判断元素的主要性质,现在一一与读者分享方法的精髓。

问题 1 已知元素符号,怎么推测其位置? 具体它在哪一周期? 哪一族? 哪一个区? 是金属还是非金属?

问题 2 已知元素的原子序数,怎么推测其位置? 具体它在哪一周期? 哪一族? 哪一个区? 是金属还是非金属?

问题 3 已知元素的特征电子构型,怎么推测其位置? 具体它在哪一周期? 哪一族? 哪一个区? 是金属还是非金属?

问题 4 怎样书写元素的特征电子构型?

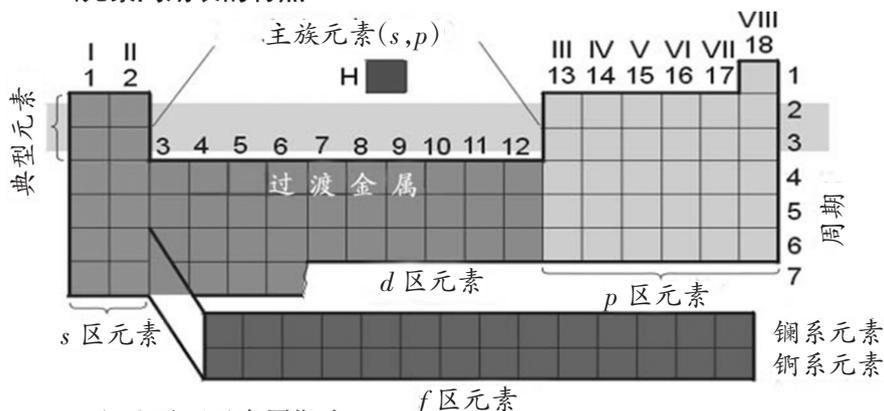
问题 5 如何预测元素的性质? 如原子或离子半径,化合价,氧化性,还原性,金属性,非金属性,酸碱性,活泼性等等。

问题 6 一氧化碳一定有害吗? 为什么? 氧气一定有益吗? 为什么?

本篇可通过两个专题解决以上问题,专题一为元素位置推测,主要推测元素所处的周期、族、区以及该族非金属元素的个数、原子轨道能级高低快速判断法、特征电子构型;专题二为元素性质推测,主要讲解六大汉字或对称性规律及其十大物理性质规律。

专题一 元素位置推测

一、元素周期表的特点



(一) 平面元素周期表

观察直观,“U”型结构,性质数据丰富,如相对原子质量、电负性、电离能、亲和能、酸碱性及常见氧化态及其发现年代,具体见附图 15。

(二) 立体元素周期表

层次分明,后排类似高楼大厦,金属坚硬放在左下角,非金属比较轻放在右上角,基础非常结实,位于前排的镧系和锕系好似屏障一样,整体排布非常和谐,具体见附图 16。

(三) 棱台元素周期表

周期的变化情况非常有规律,整体好似一座“金字塔”,向下层数增多,半径增大,由内向外物质的活泼性依次减弱,越来越复杂,好似“地球地壳”的结构,具体见附图 17。

(四) 扇形元素周期表

扇子易损的部位有三处:两侧与外缘,说明了元素的稳定情况,一侧为 IA 金属性最活泼,另一侧为 VIIA 非金属性最活泼,外缘具有

放射性,具体见附图 18。

(五) 状态元素周期表

单质状态及其性质,银白色是主调,黄色是调色剂,非金属颜色状态变化多样,具体见附图 19。

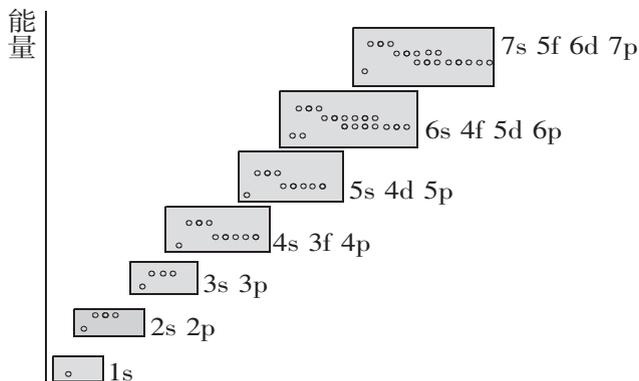
(六) 动态元素周期表

二、原子轨道能级高低快速判断法

(一) 鲍林近似能级图

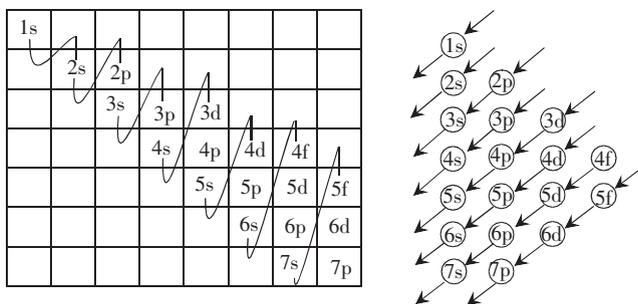
美国著名化学家 Pauling(鲍林),经过计算,将能量相近的原子轨道组合,形成能级组。

第一组 1s;第二组 2s2p;第三组 3s3p;第四组 4s3d4p;第五组 5s4d5p;第六组 6s4f5d6p;第七组 7s5f6d7p。



(二) 方格图示法

7×7 的方格。



(三)记数法

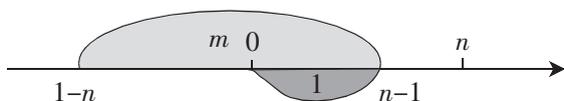
1, 2, 3, 33, 434, 545, 6456, 7567, 1 个 1, 2 个 2, 3 个 3, 4 个 4, 5 个 5, 等等, 相同数里第一个为 s, 第二个为 p, 第三个为 d 等等, 即为 1s, 2s2p, 3s3p, 4s3d4p, 5s4d5p, 6s4f5d6p, 7s5f6d7p。

(四)徐光宪的近似规律

$n+0.7l$; INT($n+0.7l$) 取整后为能级组, 数值大小定先后。

主量子数为 n , 角量子数 l 为 $(0, n-1)$, 角量子数 l 为 $[1-n, n-1]$ 。

原子轨道	$n+0.7l$	能级组
1s	1.0	I
2s 2p	2.0 2.7	II
3s 3p	3.0 3.7	III
4s 3d 4p	4.0 4.4 4.7	IV
5s 4d 5p	5.0 5.4 5.7	V
6s 4f 5d 6p	6.0 6.1 6.4 6.7	VI
7s 5f 6d	7.0 7.1 7.4	VII



(五) 通式法

观察能级交错的特点, 可知同一能级 ns 和 np 位于两侧, 从 np 开始依次向前减小为 $(n-1)d, (n-2)f, \dots$, 必须记住 $spdf$ 最小出现为 $1s2p3d4f$, 即可得通式“ $ns(n-2)f(n-1)dnp$ ”。“ $ns(n-2)f(n-1)dnp$ ”为同一能级组。

三、定周期——求行数

1. 当已知原子结构简图, 只需数层, 有几层为第几周期, 即为层数=周期数。

2. 当已知电子构型为 $ns(n-2)f(n-1)dnp, n=$ 周期。

3. 当已知原子序数, 只需记住 IA 的原子序数 1(1), 按照 2、8、8、18、18、32、32 依次相加, 即可得 1(1)、3(2)、11(3)、19(4)、37(5)、55(6)、87(7)。或者当已知原子序数, 只需记住 VIIA 的原子序数 2(1), 按照 8、8、18、18、32、32 依次相加, 即可得 2(1)、10(2)、18(3)、36(4)、54(5)、86(6)。另外, 还需记住镧系 La 的原子序数 57 和镱系 Ac 的原子序数 89。具体见下表。

周期	1	2	3	4	5	6	7
IA 的原子序数	1	3	11	19	37	55	87
VIIA 的原子序数	2	10	18	36	54	86	—
原子序数所处的区间	[1, 2]	[3, 10]	[11, 18]	[19, 36]	[37, 54]	[55, 86]	[87, ?]

例 1: 推求 21 号元素的周期。

推求知 1(1)、3(2)、11(3)、19(4), 21 号元素与 19 号元素同为第四周期。

例 2: 推求 76 号元素的周期。

推求知 1(1)、3(2)、11(3)、19(4)、37(5)、55(6), 76 号元素与 55 号元素同为第六周期。

例 3: 已知 $\textcircled{+21} \left. \begin{array}{l} 2 \\ 8 \\ 9 \\ 2 \end{array} \right\}$, 有 4 层, 为第四周期。

例 4: 已知 $(+76) \left. \begin{array}{l} 2 \\ 8 \\ 18 \\ 32 \\ 14 \\ 2 \end{array} \right\}$, 有 6 层, 为第六周期。

例 5: 已知 $4s^1 3d^5, n = \text{周期} = 4$ 。

例 6: 已知 $6s^1 6p^5, n = \text{周期} = 6$ 。

四、定族数——求列数

1. 记住 $123(\geq 4, 15)45678(3)12345678$, 在 12 处进行分割, 即为 $12, 3(\geq 4, 15)45678(3)12, 345678$, 即可得两头为 A 族, 中间为 B 族, 形似句子的成分“主+谓+宾”。

2. 若原子序数较靠近 IA 的原子序数, 就用未知的原子序数 - IA 的原子序数 + 1 = 未知的元素的顺列数。

3. 若原子序数较靠近 VIIIA 的原子序数, 就用 VIIIA 的原子序数 - 未知的原子序数 + 1 = 未知的元素的倒列数。

例 7: 推求 21 号元素的族数。

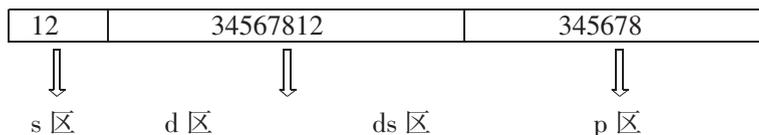
推求知 $1(1)、3(2)、11(3)、19(4)$, 21 号元素与 19 号元素同周期, 所以 $21 - 19 + 1 = \text{顺} 3 \text{ 列}$, 即为 IIIB。

例 8: 推求 76 号元素的族数。

推求知 $1(1)、3(2)、11(3)、19(4)、37(5)、55(6)、87(7)$, 76 号元素与 86 号元素同周期, 所以 $86 - 76 + 1 = \text{倒} 11 \text{ 列}$, 即为 VIII。

五、定分区——看族的位置

1. 记住 $123(\geq 4, 15)5678(3)1235678$, 在 12 处进行分割, 好似“能级交错”, 即为 $12, 3(\geq 4, 15)45678(3)12, 345678$, 即可得前 12 为 s 区, 依次为 $s^1、s^2$; 后 345678 为 p 区, 依次为 $s^2p^1、s^2p^2、s^2p^3、s^2p^4、s^2p^5、s^2p^6$; 中间 12 为 ds 区, 中间 345678(3) 为 d 区, 但中间 3 的第六、七周期为的元素为 f 区, 依次为 4f、5f。如图所示。



O、F、P、S、B)；金属元素不定，所处左下角，只有 5 个元素为 1 个字母 (K、V、Y、W、U)。

例 15：求 VIIA、IA 的非金属元素数。

VIIA 的非金属元素个数=族数-2|=|7-2|=5 如氟、氯、溴、碘、砷。

IA 的非金属元素个数=族数-2|=|1-2|=1，如氢。

七、特征电子构型——定周区

1. 由原子序数推测

如 29 号元素与 19 号元素同为第四周期，所以 $29-19+1=$ 顺 11 列，为 ds， $4s^13d^{10}(1s^22s^22p^63s^23p^64s^13d^{10})$ 。

2. 原子结构简图推测

已知 $\textcircled{+21} \left. \begin{array}{l} 2 \\ 8 \\ 9 \\ 2 \end{array} \right\}$ ，则与 19 号元素同为第四周期，所以 $21 \pm 19 + 1 =$ 顺 4 列，为 d 区， $4s^23d^1$

已知 $\textcircled{+43} \left. \begin{array}{l} 2 \\ 8 \\ 18 \\ 13 \\ 2 \end{array} \right\}$ ，则与 37 号元素同为第五周期，所以 $43 - 37 + 1 =$ 顺 7 列，为 d 区， $5s^24d^5$

已知 $\textcircled{+33} \left. \begin{array}{l} 2 \\ 8 \\ 18 \\ 5 \end{array} \right\}$ ，则与 36 号元素同为第四周期，所以 $36 - 33 + 1 =$ 倒 4 列，为 p 区， $4s^24p^3$

3. 特殊情况

副族元素的电子排布只有 24、29、41、42、44、45、79 号元素为 $ns^1(n-1)d^x$ ，47 号元素 $(n-1)d^{10}$ ，其余元素为 $ns^2(n-1)d^x$ 。

八、原子结构简图——填满两定

1. 由特征电子构型推测：内部全部填满定外层与次外层的电子数，外层电子数由族定，次外层的电子数等于原子序数-内层电子数-外层电子数。

$$4s^23d^1, +21=2+8+9+2。$$

$$5s^24d^5, +43=2+8+18+13+2。$$

$$4s^24p^3, +33=2+8+18+5。$$

2. 由原子序数推测: 先推测特征电子构型, 内部全部填满, 再定外层与次外层的电子数。

填空

1. $4p$ 亚层中轨道的主量子数为_____, 角量子数为_____, 该亚层的轨道最多可以有_____种空间取向, 最多可容纳_____个电子。

2. 42号元素 Mo 的电子构型为_____; 其最外层电子的四个量子数为_____; 价层 d 轨道的符号为_____。

3. 周期表中 s 区, p 区, d 区和 ds 区元素是价电子构型分别为_____, _____, _____和_____, 其中 d 区元素具有的特殊价电子构型为_____, 该元素的名称为_____, 元素符号_____是_____。第四周期元素中, $4p$ 轨道半充满的是_____, $3d$ 轨道半充满的是_____, $4s$ 轨道半充满的是_____, 价层中 s 电子数与 d 电子数相同的是_____。周期表中最活泼的金属为_____, 最活泼的非金属是_____; 原子序数最小的放射性元素为第_____周期元素, 其元素符号为_____。

4. 给出下列元素的原子核外电子排布式: W, Nb, Ru, Rh, Pd, Pt。

5. 比较原子轨道的能量高低:

氢原子中, E_{3s} —— E_{3p} , E_{3d} —— E_{4s}

钾原子中, E_{3s} —— E_{3p} , E_{3d} —— E_{4s}

练习

1. 某元素位于周期表中 36 号元素之前, 该元素失去 2 个电子以后, 在角量子数 $l=2$ 的轨道上正好半充满, 试回答:

- (1) 该元素的原子序数, 符号, 所处周期和族;
- (2) 写出表示全部价电子运动状态的四个量子数;
- (3) 该元素最高价氧化物水合物的分子式及酸碱性。

2. 某元素原子序数为 33, 试问:

(1) 此元素原子的电子总数是多少?有多少个未成对电子?

(2) 它有多少个电子层?多少个能级?最高能级组中的电子数是多少?

(3) 它的价电子数是多少?它属于第几周期?第几族?是金属还是非金属?最高化合价是几?

3. 写出原子序数为 24 的元素的名称、符号及其基态原子的电子排布式,并用四个量子数分别表示每个价电子的运动状态。

4. 19 号元素 K 和 29 号元素 Cu 的最外层中都只有一个 4s 电子,但二者的化学活泼性相差很大。试从有效核电荷和电离能说明之。

5. 写出下列元素原子的电子排布式,并给出原子序数和元素名称。

(1) 第三个稀有气体;

(2) 第四周期的第六个过渡元素;

(3) 电负性最大的元素;

(4) 4p 半充满的无素;

(5) 4f 填 4 个电子的元素。

6. 有 A, B, C, D 四种元素。其中 A 为第四周期元素,与 D 可形成 1:1 和 1:2 原子比的化合物。B 为第四周期 d 区元素,最高氧化数为 7。C 和 B 是同周期元素,具有相同的最高氧化数。D 为所有元素中电负性第二大元素。给出四种元素的元素符号,并按电负性由大到小排列之。

7. 有 A, B, C, D, E, F 元素,试按下列条件推断各元素在周期表中的位置、元素符号,给出各元素的价电子构型。

(1) A, B, C 为同一周期活泼金属元素,原子半径满足 $A > B > C$,已知 C 有 3 个电子层;

(2) D, E 为非金属元素,与氢结合生成 HD 和 HE。室温下 D 的单质为液体, E 的单质为固体;

(3) F 为金属元素,它有 4 个电子层并且有 6 个单电子。

8. 由下列元素在周期表中的位置,给出元素名称、元素符号及其价层电子构型。

- (1)第四周期第 VIB 族;
- (2)第五周期第 IB 族;
- (3)第五周期第 IVA 族;
- (4)第六周期第 IIA 族;
- (5)第四周期第 VIIA 族。

9.A,B,C 三种元素的原子最后一个电子填充在相同的能级组轨道上,B 的核电荷比 A 大 9 个单位,C 的质子数比 B 多 7 个;1 mol 的 A 单质同酸反应置换出 1gH₂, 同时转化为具有氙原子的电子层结构的离子。判断 A,B,C 各为何元素,A,B 同 C 反应时生成的化合物的分子式。

10.对于 116 号元素,请给出(1)钠盐的化学式;(2)简单氢化物的化学式;(3)最高价态的氧化物的化学式;(4)该元素是金属还是非金属。